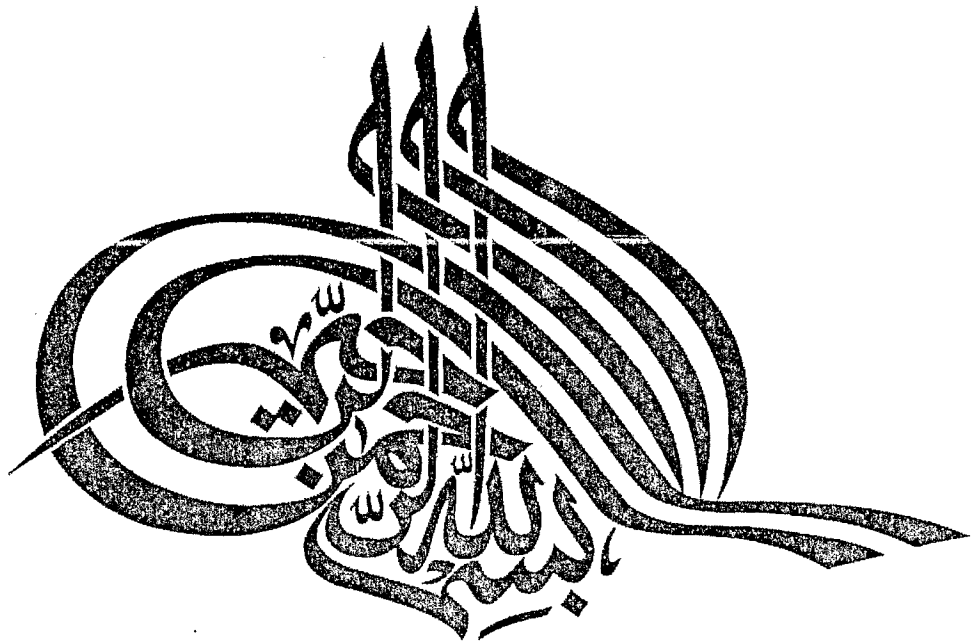


١٠٢٢٧٨

دانشکده علوم

پایان نامه دکتری در رشته فیزیک (ماده‌ی چگال)

بررسی خواص الکترونی و اپتیکی نقطه‌ی کوانتمی بیضی‌گون با پتانسیل محدود

توسط:
قاسم رضایی

استاد راهنما:
دکتر محمود براتی خواجویی

۱۳۸۷ /۳/ ۲۳

اسفند ۱۳۸۶

۱۵۲۳۷۸

به نام خدا

بررسی خواص الکترونی و اپتیکی نقطه ی کوانتمی بیضی گون با پتانسیل محدود

به وسیله‌ی:

قاسم رضایی

پایان نامه

ارائه شده به تحصیلات تکمیلی دانشگاه به عنوان بخشی
از فعالیت‌های تحصیلی لازم برای اخذ درجه دکترا

در رشته‌ی:

فیزیک

از دانشگاه شیراز

شیراز

جمهوری اسلامی ایران

ارزیابی شده توسط کمیته پایان نامه با درجه: عالی

دکتر محمود براتی خواجویی، استاد بخش فیزیک (رئیس کمیته) .....

دکتر هادی سلامتی، استاد دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان .....

دکتر محمود مرادی، استاد بخش فیزیک .....

دکتر محمد مهدی گلشن، استادیار بخش فیزیک .....

دکتر غلامحسین بردبار، دانشیار بخش فیزیک .....

اسفند ماه ۱۳۸۶

تقدیم به

همسر، پدر و مادر مهربانم

سپاسگزاری

خداوند بزرگ و مهربان را شکر میگویم که چون همیشه منت نهاد و با الطاف بی پایانش در انجام و به پایان رساندن این رساله مرا یاری نمود.

بر خود واجب می‌دانم که مراتب سپاسگزاری خویش را از تمامی اساتید بزرگوار بخش فیزیک دانشگاه شیراز، که افتخار شاگردی ایشان را داشته ام، بیان نمایم. از استاد ارجمند جناب آقای دکتر محمود براتی که هدایت این رساله را به عهده داشتند و با رهنمودهای ارزشمند خود مرا در انجام این رساله یاری کردند تشکر می‌نمایم. از اعضای محترم کمیته‌ی پایان نامه، آقایان دکتر محمود مرادی، دکتر محمد مهدی گلشن، دکتر غلامحسین بردبار و همچنین جناب آقای دکتر هادی سلامتی از دانشگاه صنعتی اصفهان سپاسگزاری می‌نمایم. در پایان ازهمسر مهربان، پدر و مادر فداکارم که همیشه مدیون آنها هستم، تشکر و سپاسگزاری می‌کنم، امیدوارم که قدردان زحمات این عزیزان باشم.

چکیده

بررسی خواص الکترونی و اپتیکی نقطه‌ی کوانتمی بیضی‌گون با پتانسیل محدود

به وسیله ی:

قاسم رضایی

نقطه‌ی کوانتمی یا ساختار شبه صفر بعدی، یکی از سیستم‌های کوانتمی نیم‌رسانا است که در آن حرکت حامل‌های بار در تمام راستاهای فضایی محدود می‌باشد. این محدودیت فضایی، سبب کوانتیدگی ترازهای انرژی الکترون‌ها در نوار رسانش شده، خصوصیات فیزیکی این سیستم‌های نیم‌رسانا را دگرگون می‌سازد. علاوه بر این، یکی از مهمترین مشخصه‌های نقطه‌های کوانتمی امکان گذار بین زیر نوارها در نوار رسانش و یا ظرفیت بوده و این امر توجه بسیاری از علاقه مندان را در سال‌های اخیر به خود جلب نموده است. بررسی خواص الکترونی و اپتیکی نقطه‌های کوانتمی نه تنها از دیدگاه نظری بلکه به علت کاربرد وسیع آنها در ساخت لیزرهای نیم‌رسانا، قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی مورد توجه بوده است.

در این رساله یک نقطه‌ی کوانتمی بیضی‌گون با ارتفاع پتانسیل محدود و خروج از مرکز بسیار کوچک را در نظر گرفته و با استفاده از نظریه‌ی اختلال مستقل از زمان غیر تبهگن ترازهای انرژی الکترون محبوس در نقطه را در غیاب و همچنین در حضور ناخالصی هیدروژنی محاسبه کرده و چگونگی تغییرات ترازهای انرژی و انرژی بستگی ناخالصی را بر حسب شعاع و خروج از مرکز نقطه مورد بررسی قرار می‌دهیم. نتایج به‌دست آمده نشان می دهد که، تغییرات انرژی بستگی ناخالصی هیدروژنی نسبت به شعاع نقطه شبیه به نقطه‌ی کوانتمی کروی است. اما انرژی بستگی با ثابت بیضی‌گون رابطه‌ی عکس دارد. این رفتار برای تراز انرژی $2P_o$ واضح‌تر می‌باشد. به‌طوری‌که بسته به ابعاد نقطه و ثابت بیضی‌گون انرژی بستگی منفی می‌شود.

پس از آن با به کارگیری فرمول بندی ماتریس چگالی و روش تکرار، مرتبه‌های مختلف پذیرفتاری الکتریکی را محاسبه کرده و عبارت‌های تحلیلی برای محاسبه‌ی تغییرات ضرایب جذب و شکست خطی، غیر خطی مرتبه‌ی سوم و کل نقطه مربوط به گذار بین زیر نوارها را به‌دست می‌آوریم. در نهایت تأثیر شعاع، خروج از مرکز، ارتفاع پتانسیل دیواره‌ی نقطه و شدت نور فرودی را بر تغییرات ضرایب جذب و شکست مورد مطالعه قرار می‌دهیم. با توجه به نتایج به‌دست آمده درمی‌یابیم که تغییرات ضرایب جذب و شکست قویاً به شدت نور فرودی و پارامترهای ساختار مانند غلظت آلومینیوم، اندازه و شکل نقطه وابسته می‌باشد.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول: مقدمه	۱
۱-۱- چاه کوانتمی	۳
۱-۲- سیم کوانتمی	۴
۱-۳- نقطه‌ی کوانتمی	۵
فصل دوم: بررسی اثر پیکر کوانتمی بر ترازهای انرژی و چگالی حالت‌های الکترونی مواد نیم‌رسانا	۱۰
۲-۱- مقدمه	۱۱
۲-۲- ساختار بلوری نیم‌رساناها	۱۱
۲-۲-۱- شبکه‌ی فضایی و ساختار بلوری الماس و کانی سولفید روی	۱۲
۲-۲-۲- تقریب جرم مؤثر	۱۳
۲-۲-۳- مفاهیم مربوط به نوارهای انرژی در نیم‌رسانا	۱۵
۲-۳- چگالی حالت‌های نیم‌رسانای کپه‌ای	۱۸
۲-۴- ترازهای انرژی و چگالی حالت‌های سیستم‌های کوانتمی محدود	۲۰
۲-۴-۱- ساختارهای نا همسان و سیستم‌های کوانتمی محدود	۲۰
۲-۴-۲- ترازهای انرژی و چگالی حالت‌های چاه کوانتمی با سد پتانسیل بی نهایت	۲۴
۲-۴-۳- ترازهای انرژی و چگالی حالت‌های سیم کوانتمی با سد پتانسیل بی نهایت	۲۷
۲-۴-۴- ترازهای انرژی و چگالی حالت‌های نقطه‌ی کوانتمی مکعبی شکل با سد پتانسیل بی نهایت	۲۹
۲-۵- نتیجه گیری	۳۱

فصل سوم: انرژی بستگی ناخالصی هیدروژنی در یک نقطه کوانتمی بیضی‌گون با پتانسیل محدود ۳۳

۳-۱- مقدمه ۳۴
۳-۲- ترازهای انرژی الکترون آزاد در نقطه‌ی کوانتمی بیضی‌گون با پتانسیل محدود ۳۴
۳-۲-۱- محاسبه‌ی هامیلتونی در مختصات جدید ۳۴
۳-۲-۲- محاسبه‌ی ترازهای انرژی الکترون محبوس در نقطه‌ی کوانتمی ۳۷
۳-۳- ترازهای انرژی و انرژی بستگی ناخالصی هیدروژنی در نقطه‌ی کوانتمی بیضی‌گون با پتانسیل محدود ۳۸
۳-۴- محاسبات و نتایج ۴۲
۳-۵- نتیجه گیری ۴۸

فصل چهارم: مطالعه‌ی خواص نوری یک نقطه‌ی کوانتمی بیضی‌گون با پتانسیل محدود ۴۹

۴-۱- مقدمه ۵۰
۴-۲- تحول زمانی ماتریس چگالی ۵۱
۴-۳- حل معادله‌ی تحول زمانی ماتریس چگالی با استفاده از روش اختلال ۵۳
۴-۴- محاسبه‌ی تغییرات ضرایب جذب و شکست خطی و غیر خطی مرتبه‌ی سوم با استفاده از ماتریس چگالی ۵۶
۴-۴-۱- محاسبه‌ی پذیرفتاری خطی ۵۶
۴-۴-۲- محاسبه‌ی پذیرفتاری غیر خطی مرتبه‌ی دوم ۵۸
۴-۴-۳- محاسبه پذیرفتاری غیر خطی مرتبه‌ی سوم ۶۲
۴-۴-۴- محاسبه‌ی تغییرات ضرایب جذب و شکست نقطه‌ی کوانتمی ۶۸
۴-۵- محاسبات عددی و نتایج ۷۰
۴-۶- نتیجه گیری ۸۰

فصل پنجم: نتیجه گیری و پیشنهادات ۸۲

فهرست منابع
چکیده به زبان انگلیسی

فهرست جدول ها

عنوان | صفحه

جدول۲-۱- پارامترهای مربوط به $GaAs$ و$AlAs$. ۲۳
جدول۳-۱- مشخصات فیزیکی نقطه‌ی کوانتمی و محیط اطراف آن. ۴۳
جدول۴-۱- تاثیر شکل نقطه بر ترازهای انرژی و تغییرات ضریب جذب. ۸۰

فهرست شکل ها

عنوان صفحه

شکل۱-۱- طرح نمادین چاه کوانتمی $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ و نمایش حرکت الکترون در صفحه‌ی چاه. ۴

شکل۱-۲- نمایش سیم کوانتمی $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$، با سطح مقطع مربعی. ۵

شکل۱-۳- طرح نقطه‌ی کوانتمی $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$. ۶

شکل۲-۱- الف) کمپلکس چهار وجهی کربن ناشی از اربیتال‌های هیبریدی sp^3، ب) ساختار الماسی بلورهای کربن، سیلیکان و ژرمانیم، و پ) ساختار بلوری گالیم - آرسنایدِ، که مشابه ساختار الماسی است با این تفاوت که هر اتم با چهار اتم از نوع دیگر احاطه می‌شود. ۱۳

شکل۲-۲- نمودار نوار ظرفیت و رسانش با گاف نواری مستقیم و غیر مستقیم. نوار رسانش نیم‌رسانای با گاف مستقیم با خط پر و نوار رسانش مربوط به نیم‌رسانای غیر مستقیم با خط چین نمایش داده شده است. ۱۵

شکل۲-۳- نمودار طرح وار ترازهای انرژی بلور کوالانسی تشکیل شده از اتم‌های چهار ظرفیتی مانند ژرمانیم یا ترکیبات دوتایی مانند گالیم- آرسنایدِ. ۱۶

شکل۲-۴- نمایش ساختار نواری الف) گالیم - آرسنایدِ و ب) ژرمانیم در دمای اتاق. ۱۷

شکل۲-۵- چگالی حالت‌های نوار رسانش نیم‌رسانای سه بعدی بر حسب انرژی. ۲۰

شکل۲-۶- آرایش نواری اتصال ناهمسان نیم‌رساناهای مختلف. الف) نوع I، ب) نوع II و پ) نوع III. ۲۱

شکل۲-۷- طرح آرایش نواری برای محاسبه‌ی برآمدگی‌ها در نوارهای انرژی. ۲۲

شکل۲-۸- چگالی حالت‌های دو بعدی برای چاه کوانتمی $GaAs$ با ضخامت بسیار کم و سد پتانسیل بی نهایت بلند. ۲۶

شکل۲-۹- سیم کوانتمی با سطح مقطع مستطیلی و سد پتانسیل بی نهایت. ۲۷

شکل۲-۱۰- چگالی حالت‌های سیم کوانتمی یک بعدی $GaAs$ با ابعاد بسیار کوچک، احاطه شده با سد پتانسیل بی نهایت. ۲۹

شکل۲-۱۱- نقطه‌ی کوانتمی مکعبی شکل با سد پتانسیل بی نهایت و طول اضلاع L_x، L_y و L_z. ۳۰

شکل۲-۱۲- چگالی حالت‌های یک نقطه‌ی کوانتمی با سد پتانسیل بی نهایت بلند و طول ابعاد $L_x = L_y = L_z$. ۳۱

شکل۳-۱- طرح نمادین یک نقطه‌ی کوانتمی بیضی‌گون با پتانسیل محدود و سطح مقطع دایره ای در صفحه‌ی $X-Y$. ۳۵

شکل۳-۲- ترازهای انرژی ناخالصی هیدروژنی در نقطه کوانتمی کروی. ۴۳

شکل۳-۳- ترازهای انرژی ناخالصی هیدروژنی در نقطه‌ی کوانتمی بیضی‌گون ($\beta = ۰/۲۵$). ۴۴
شکل۳-۴- انرژی بستگی تراز $۱S$ مربوط به ناخالصی هیدروژنی بر حسب شعاع نقطه، و مقدارهای مختلف ثابت بیضی‌گون. ۴۵
شکل۳-۵- انرژی بستگی تراز $۲S$ مربوط به ناخالصی هیدروژنی بر حسب شعاع نقطه، و مقدارهای مختلف ثابت بیضی‌گون. ۴۶
شکل۳-۶- انرژی بستگی تراز $۲P_۰$ مربوط به ناخالصی هیدروژنی بر حسب شعاع نقطه، و مقدارهای مختلف ثابت بیضی‌گون. ۴۷
شکل۴-۱- نمودارهای فاینمن برای فرآیندهای غیر خطی مرتبه‌ی دوم . الف) تولید جمع بسامدها، ب) تولید تفاضل بسامدها. ۵۹
شکل۴-۲- نمودارهای فاینمن برای فرایندهای غیر خطی مرتبه‌ی سوم. الف) ترکیب چهار موج، ب) تولید هماهنگ مرتبه‌ی سه، پ) اثر نوری کر، و ت) اثر رامان واداشته. ۶۳
شکل۴-۳- تغییرات ضریب جذب خطی، غیر خطی مرتبه‌ی سوم و کل نقطه‌ی کوانتمی به صورت تابعی از انرژی فوتون فرودی به ازای $\beta = ۰/۲۵, I = ۱/۰ \frac{MW}{cm^۲}$ ، $x = ۰/۲$ و $r_۰ = ۰/۶ a_B^*$. ۷۱
شکل۴-۴- تغییرات ضریب جذب کل نقطه‌ی کوانتمی به صورت تابعی از انرژی فوتون فرودی و ثابت بیضی‌گون به ازای $I = ۱/۰ \frac{MW}{cm^۲}$ ، $x = ۰/۲$ و $r_۰ = ۰/۶ a_B^*$. ۷۲
شکل۴-۵- تغییرات ضریب جذب کل نقطه‌ی کوانتمی به صورت تابعی از انرژی فوتون فرودی و شعاع نقطه‌ی کوانتمی به ازای $\beta = ۰/۲۵, I = ۱/۰ \frac{MW}{cm^۲}$ و $x = ۰/۲$. ۷۳
شکل۴-۶- تغییرات ضریب جذب کل نقطه‌ی کوانتمی به صورت تابعی از انرژی فوتون فرودی و غلظت آلومینیوم به ازای $\beta = ۰/۲۵, I = ۱/۰ \frac{MW}{cm^۲}$ و $r_۰ = ۰/۶ a_B^*$. ۷۴
شکل۴-۷- تغییرات ضریب جذب کل نقطه‌ی کوانتمی به صورت تابعی از انرژی فوتون و شدت نور فرودی به ازای $\beta = ۰/۲۵$ ، $x = ۰/۲$ و $r_۰ = ۰/۶ a_B^*$. ۷۵
شکل۴-۸- تغییرات ضرایب شکست خطی، غیر خطی مرتبه‌ی سوم و کل نقطه‌ی کوانتمی با ثابت بیضی‌گون $\beta = ۰/۲۵$، به صورت تابعی از انرژی فوتون فرودی به ازای $I = ۱/۰ \frac{MW}{cm^۲}$ ، $x = ۰/۲$ و $r_۰ = ۰/۶ a_B^*$. ۷۶
شکل۴-۹- تغییرات ضریب شکست کل به صورت تابعی از انرژی فوتون فرودی و ثابت بیضی‌گون به ازای $I = ۱/۰ \frac{MW}{cm^۲}$ ، $x = ۰/۲$ و $r_۰ = ۰/۶ a_B^*$. ۷۷
شکل۴-۱۰- تغییرات ضریب شکست کل به صورت تابعی از انرژی فوتون فرودی و شعاع نقطه، به ازای $I = ۱/۰ \frac{MW}{cm^۲}$, $\beta = ۰/۲۵$ و $x = ۰/۲$. ۷۸
شکل۴-۱۱- تغییرات ضریب شکست کل به صورت تابعی از انرژی فوتون فرودی و غلظت مولی آلومینیوم، به ازای $I = ۱/۰ \frac{MW}{cm^۲}$, $\beta = ۰/۲۵$ و $r_۰ = ۰/۶ a_B^*$. ۷۹
شکل۴-۱۲- تغییرات ضریب شکست کل به صورت تابعی از انرژی و شدت فوتون فوتون فرودی به ازای $\beta = ۰/۲۵$, $x = ۰/۲$ و $r_۰ = ۰/۶ a_B^*$. ۸۰

فصل اول

مقدمه

۱- مقدمه

نیم‌رساناها گروهی از مواد هستند که رسانندگی الکتریکی آنها بین فلزات و عایق‌ها قرار دارد. یکی از ویژگی مهم نیم‌رساناها این است که خواص الکتریکی آنها با تغییر اندازه، دما، برانگیختگی نوری و میزان ناخالصی به نحو قابل ملاحظه ای تغییر می‌کند. به همین دلیل، مواد نیم‌رسانا به عنوان یک انتخاب مناسب برای تحقیق در زمینه‌ی قطعات الکترونیکی و اپتو الکترونیکی[۱] به شمار می‌روند.

مطالعات اولیه‌ی صورت گرفته در زمینه‌ی خصوصیات فیزیکی نیم‌رساناها ساختارهای تکی و یا ساختارهای همسان[۲]، شامل موادی از قبیل سیلیسیم، ژرمانیم، آرسنايد و غیره را در بر می‌گرفت. اما به تدریج مشخص شد که نیم‌رساناهای مرکب که از ترکیب عناصر ستونهای مختلف جدول تناوبی بدست می‌آیند (شامل ترکیبات III-V و II-VI)، خصوصیات بسیار جالبی خواهند داشت. این ترکیبات را ساختارهای ناهمسان[۳] می‌نامند. این ساختارهای اصولاً از دو نوع نیم‌رسانای متفاوت با ثابت شبکه‌ی تقریباً یکسان و گاف انرژی[۴] متفاوت تشکیل می‌شوند. یکی از خصوصیات مهم این سیستم ها، محدود کردن حامل‌های بار[۵] در ناحیه‌ی مشخصی از فضا و در نتیجه کنترل دینامیکی آنها است[۴-۱].

پیشنهاد استفاده از ساختارهای ناهمسان، اولین بار در سال ۱۹۵۱ توسط شاکلی[۶] ارائه شد، و پس از آن در موارد گوناگونی مورد استفاده قرار گرفت. به طوری که، بسیاری از وسایل کاربردی، مانند لیزرهای نیم‌رسانا[۷]، دیودهای نور گسیل[۸]، آشکار سازهای نوری[۹] و غیره، به علت ویژگی‌های منحصر به فرد این ساختارهای ناهمسان، بهبود یافت[۱۰-۵].

---

۱ Optoelectronic Devices
۲ Homostructures
۳ Heterostructures
٤ Energy Band Gap
٥ Charge Carrier
٦ W. Shockley
۷ Semiconductor Lasers
۸ Light-Emitting Diodes
۹ Photodetectors

علاوه بر این، پیشرفت‌های صورت گرفته در زمینه‌ی رشد بلورهای نیم‌رسانا، از قبیل برآرایی فاز مایع[۱۰]، برآرایی باریکه‌ی مولکولی[۱۱] و نشست بخار شیمیایی فلز آلی[۱۲]، این امکان را فراهم ساخته تا بتوان ابعاد نیم‌رساناها را با دقت واحدهای اتمی کنترل نموده، از طریق تولید اتصالات و یا ساختارهای ناهمسان، نیم‌رساناهای بسیار نازک با کیفیت بالا تهیه کرد[۱۲-۱۱]. این ساختارهای فوق ریز، سیستم‌های کوانتمی نامیده می‌شوند. از آنجا که اغلب خواص فیزیکی یک سیستم به ابعاد آن سیستم وابسته است، انتظار می‌رود که خواص فیزیکی این ساختارهای فوق ریز نسبت به ساختارهای کپه‌ای[۱۳] کاملاً متفاوت باشد. بنابراین، در سال‌های اخیر مطالعات بسیاری در زمینه‌ی بررسی اثرات پیکر[۱۴] بر خواص فیزیکی (الکترونی و نوری) این ساختارها به هر دو صورت عملی و نظری صورت گرفته است. بررسی این ساختارهای کوانتمی نه تنها به خاطر خواص الکترونی و نوری جالب آنها، بلکه به علت کاربردشان در قطعات الکترونیکی و ابزارهای نوری توجه بسیاری را به خود جلب کرده است [۹-۶].

سیستم‌های کوانتمی بر حسب محدودیت فضایی اعمال شده بر حرکت حامل‌های بار آنها، به سه دسته‌ی اصلی چاه کوانتمی[۱۵]، سیم کوانتمی[۱۶] و نقطه‌ی کوانتمی[۱۷] دسته بندی می‌شود. بر خلاف حالت کپه‌ای که حامل‌های بار می‌توانند به طور آزادانه در تمام راستاهای فضایی حرکت کنند، چاه ها، سیم‌ها و نقطه‌های کوانتمی به ترتیب دارای محدودیت فضایی یک، دو و سه بعدی می‌باشند. در ادامه این سیستم‌های کوانتمی را به طور مشروح مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

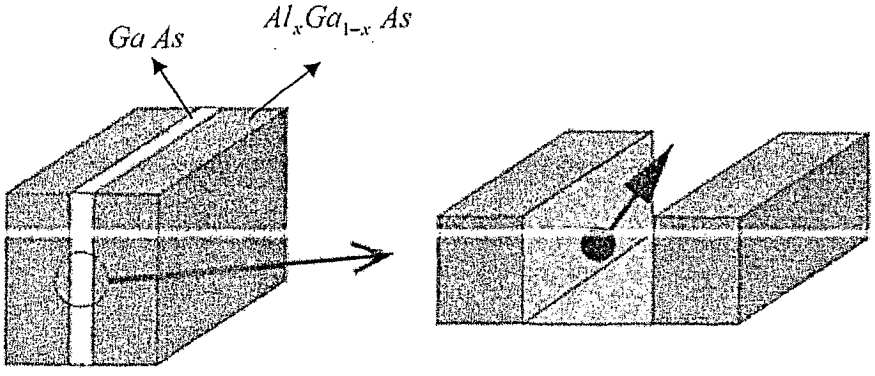
۱-۱- چاه کوانتمی

چاه کوانتمی یک لایه نیم‌رسانای بسیار نازک با گاف انرژی مشخص بوده که بین دو نیم‌رسانای دیگر با گاف انرژی بزرگتر قرار گرفته، به طوری که در آن حرکت حامل‌های بار در یک راستا محدود و در دو راستای دیگر هیچ محدودیتی بر حرکت حامل‌ها وارد نمی‌شود. این سیستم‌ها را ساختارهای شبه دو بعدی نیز می‌نامند. در چاه کوانتمی ضخامت نیم‌رسانای با گاف کوچکتر

---

۱۰ Liquid Phase Epitaxi
۱۱ Molecular Beam Epitaxy
۱۲ Metalorganic Chemical Vapour Deposition
۱۳ Bulk Structures
۱٤ Size Effects
۱٥ Quantum Well
۱٦ Quantum Wire
۱۷ Quantum Dot

باید از مرتبه‌ی طول موج دوبروی[۱۸] حامل‌ها بوده و یا از پویش آزاد میانگین[۱۹] آنها بسیار کوچکتر باشد تا اثرات پیکر کوانتمی[۲۰] در این ساختار قابل ملاحظه شود.



شکل۱-۱- چاه کوانتمی $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ و نمایش حرکت الکترون در صفحه‌ی چاه.

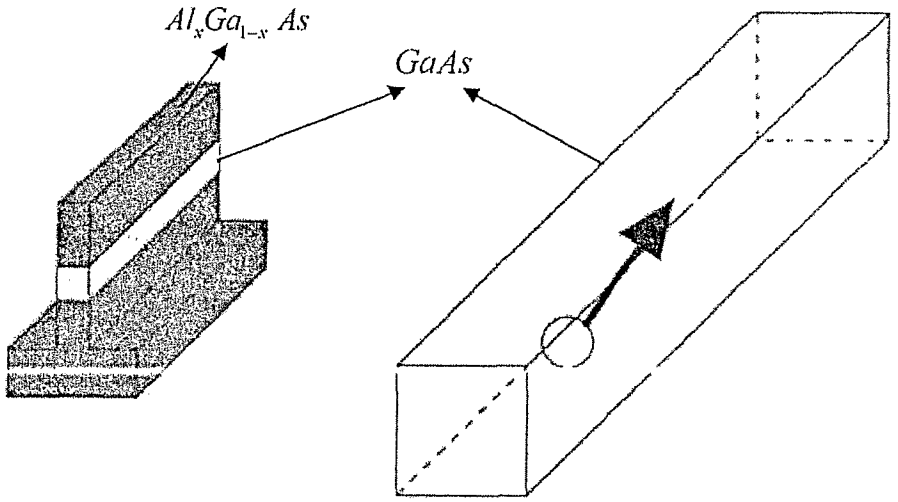
ازاین روی، ضخامت چاه کوانتمی معمولا از کسری از یک نانو متر تا ۱۰ الی ۲۰ نانو متر می‌باشد. از این سیستم کوانتمی در ساخت لیزرهای نیم‌رسانا به طور گسترده استفاده می‌شود[۷]. شکل(۱-۱) ساختار چاه کوانتمی $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ و همچنین حرکت الکترون در صفحه‌ی چاه را به طور نمادین نمایش می‌دهد.

۱-۲- سیم کوانتمی

سیم‌های کوانتمی ساختارهای شبه یک بعدی بوده به طوری که در این ساختارها حرکت حامل ها، در دو راستا محدود شده و تنها در راستای محور سیم به طور آزادانه صورت می‌گیرد. تاکنون سیم‌های کوانتمی با سطح مقطع‌های مختلف ساخته شده و با موفقیت در لیزرهای سیم کوانتمی به کار رفته اند[۳]. محدودیت دو بعدی اعمال شده در سیم‌های کوانتمی سبب کوانتیدگی بیشتر ترازهای انرژی و در نتیجه تغییر توزیع چگالی حالت‌های آن نسبت به چاه‌های کوانتمی می‌شود.

---

۱۸ Broglie Wavelenght
۱۹ Mean Free Pathde۲۰
۲۰ Quantum Size Effects



شکل۱-۲- سیم کوانتمی $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ با سطح مقطع مربعی.

در شکل (۱-۲) طرح یک سیم کوانتمی با سطح مقطع مربعی ارائه شده است. همانطوری که ملاحظه می‌شود الکترون در دو راستای فضایی محدود بوده و تنها در راستای محور سیم، بر حرکت آن هیچ محدودیتی وارد نمی‌شود.

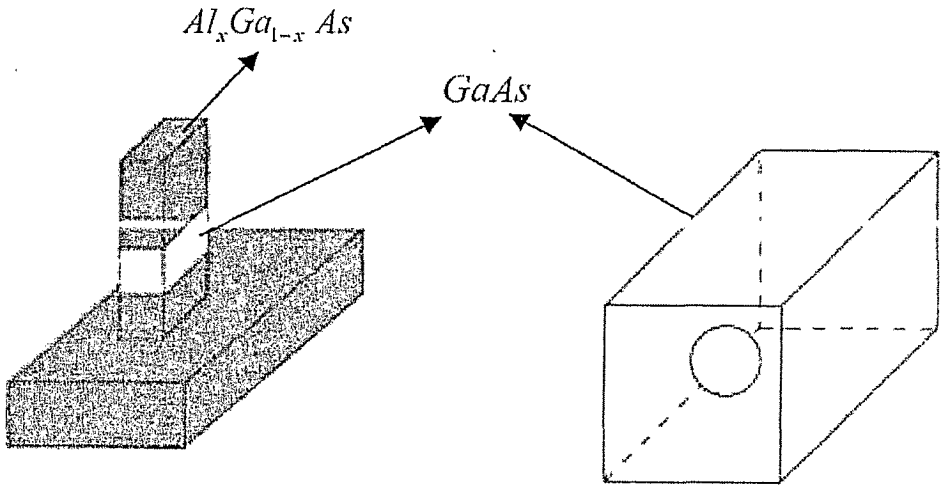
۱-۳- نقطه‌ی کوانتمی

نقطه‌های کوانتمی نیم‌رسانا، یا ساختارهای شبه صفر بعدی ، یکی دیگر از ساختارهای بسیار ریز است که به علت کاربردهای فراوان به عنوان اجزای اصلی لیزرهای نیم‌رسانا، حسابگرهای کوانتمی[۲۱]، ترانزیستورهای تک الکترونی[۲۲] و غیره در سال‌های اخیر مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته است. این سیستم‌های کوانتمی را می‌توان به روش‌های مختلف تولید نمود. حکاکی نوری[۲۳] و حکاکی با بیم الکترونی[۲۴] از روش‌های متداول تولید این سیستم‌های کوانتمی است.

شکل (۱-۳) یک نقطه‌ی کوانتمی مکعبی شکل را نشان می‌دهد. در این نوع از سیستم‌های کوانتمی، الکترون‌ها و حفره‌ها در تمام راستاهای فضایی محدود می‌باشند. این محدودیت کوانتمی سبب می‌شود که ترازهای انرژی نقطه‌ی کوانتمی بر خلاف حالت کپه‌ای با ترازهای

۲۱- Quantum Computing
۲۲- Single-Electron Transistors
۲۳- Optical Lithography
۲۴- Electron Beam Lithography

انرژی کاملاً پیوسته، و سیم‌ها و چاه‌های کوانتمی با ترازهای انرژی نیمه گسسته، به طور کامل گسسته شده و چگالی حالت‌های آن کاملاً جایگزیده شود. این ویژگی منحصر به فرد منجر به پیدایش خصوصیات الکترونی و نوری بسیار جالبی در نقطه‌های کوانتمی می‌شود.



شکل ۱-۳- نقطه کوانتمی از جنس $GaAs$ که به وسیله‌ی دو لایه از جنس $Al_xGa_{1-x}As$ محصور شده است.

از نظر تاریخی، کشف نقطه‌های کوانتمی به سال ۱۹۳۲ باز می‌شود. در این سال روکسبای[۲۵] رنگ قرمز و یا زرد مشاهده شده از برخی شیشه‌های سیلیکانی را به ساختارهای بسیار ریز $CdSe$ و یا CdS واقع در آنها نسبت داد[۱۳]. پس از آن، در سال ۱۹۸۵ مشاهده شد که تغییرات در رنگ، به ترازهای انرژی ناشی از محدودیت کوانتمی نقطه‌های $CdSe$ یا CdS وابسته می‌باشد. از آن زمان به بعد، با پیشرفت تکنولوژی برآرایی باریکه‌ی مولکولی، به عنوان یک تکنولوژی برتر در زمینه‌ی رشد نقطه‌های کوانتمی در مواد مختلف، پژوهش‌های آزمایشگاهی بر نقطه‌های کوانتمی به طور چشمگیری افزایش یافت [۲۶-۱۴] .

در کنار پیشرفت‌ها و پژوهش‌های آزمایشگاهی، ایساکی[۲۶] و تسو[۲۷] در سال ۱۹۷۰ مفاهیم نظری نقطه‌های کوانتمی را برای اولین بار ارائه نمودند [۲۷]. پس از آن تحقیقات بسیاری در زمینه‌ی بررسی اثرات پیکر کوانتمی بر خواص الکترونی و اپتیکی این ساختارها انجام شد [۲۷-۶۱].

مطالعه‌ی ترازهای انرژی الکترون آزاد و ناخالصی هیدروژن گونه در سیستم‌های کوانتمی گوناگون با شکل‌های مختلف و در دو حالت پتانسیل محدود و نامحدود، در دو دهه‌ی گذشته به طور گسترده بررسی شده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که ترازهای انرژی این

۲۵- H.P. Rocksby
۲۶- Esaki
۲۷- Tsu

سیستم‌های کوانتمی به میزان قابل ملاحظه ای به اندازه سیستم‌ها بستگی داشته، بـه گونـه ای که کاهش اندازه سبب افزایش شکاف بین ترازهای انرژی و برعکس می‌شود[۸۱-۶۲].

علاوه بر این، مشاهده شده کـه کـاهش انـدازه، افـزایش قابـل توجـه خـواص غیـر خطـی ایـن سیستم‌ها را در پی دارد. بنابراین، مطالعه‌ی خواص غیر خطی سیستم‌های کـوانتمی نـیم‌رسـانا شاملِ اثرات اندازه و شکل نقطه، ارتفاع پتانسیل دیواره‌ی سیستم و همچنـین اثـر میـدان‌هـای الکترومغناطیـسی خـارجی بـر تغییـرات ضـریب جـذب[۲۸] و ضـریب شکـست[۲۹] نـوری، خلـق هماهنگ‌های مرتبه‌ی دوم[۳۰] و مرتبه‌ی سوم[۳۱] مربوط به گذار بین نوارها[۳۲] و بین زیـر نوارهـا[۳۳]، توجه بسیاری از پژوهشگران را در سالهای اخیر جلب کرده است [۱۰۱-۸۲ ,۲۷].

برای مطالعه‌ی خصوصیات فیزیکی نقطه‌های کوانتمی بایـد معادلـه‌ی شـرودینگر را بـا شـرایط مرزی مناسب در این سیستم‌ها حل نمود. برای حل معادله‌ی شرودینگر در ایـن سـاختارها بـه طور معمول از تقریب، جرم مؤثر[۳۴] و تقریب سهموی تک باند[۳۵] بـرای نـوار رسـانش و ظرفیـت، استفاده می‌شود. علاوه بر این، اگر ارتفاع پتانسیل دیواره‌ی این سیستم‌ها بی نهایت فرض شود، به آسانی می‌توان محاسبات را انجام داد و خصوصیات فیزیکی را به‌دست آورد. از طرفـی، چـون ارتفاع پتانسیل دیواره‌ی این ساختارها به طور طبیعی محدود است، انتظار مـی‌رود خـصوصیات فیزیکی نسبت به حالت قبل متفاوت باشد. در چنـین وضـعیتی، معادلـه‌ی شـرودینگر فقـط در سیستم‌های خاصی مانند یک نقطه‌ی کوانتمی کروی[۳۶]، جواب تحلیلی داشته و در بقیـه مـوارد باید با روشهای عددی و یا تقریبی مسئله را حل نمود.

بنابراین، در بیشتر پژوهش‌های نظری، نقطه را کروی در نظر گرفته و خواص فیزیکـی را مـورد مطالعه قرار می‌دهند[۶۸-۶۶] . از آنجا که در حین فرآیند رشد، تغییر شکل نقطـه‌ی کـوانتمی اجتناب ناپذیر است، در نظر گرفتن شکل‌هایی با تقارن کمتر برای نقطه‌ی کوانتمی مسأله را بـه واقعیت نزدیکتر می‌کند. بنابراین، انتظار می‌رود که با انتخاب یک نقطه‌ی کوانتمی بیضی‌گون[۳۷] نتایج قابل قبول تری نسبت به نقطه‌های کروی به‌دست آید[۳۶-۲۸].

از آنجا که حل تحلیلی و دقیق معادله‌ی شرودینگر برای الکترون محبوس در نقطه‌های کوانتمی بیضی‌گون با پتانسیل محدود امکان پذیر نیست، در تمامی کارهای ارائه شده پتانسیل دیواره را بی نهایت فرض کرده و ویژگی‌های فیزیکی را مورد بررسی قرار داده اند [۳۵-۲۸]. از این روی،

۲۸- Optical Absorption Coefficient
۲۹- Refractive Index
۳۰- Second-Harmonic Generation
۳۱- Third-Harmonic Generation
۳۲- Interband Transitions
۳۳- Intersubband Transitions
۳٤-Effective Mass Approximation
۳٥-Parabolic (One-Band) Approximation
۳٦- Spherical Quantum Dot
۳۷- Ellipsoidal Quantum Dot

با در نظر گرفتن یک نقطه‌ی کوانتمی بیضی‌گون با خروج از مرکز بسیار کوچک و ارتفاع پتانسیل محدود، و حل تقریبی معادله‌ی شرودینگر، خواص الکترونی و نوری آن را در این رساله مورد بررسی قرار می‌دهیم.

این پایان نامه شامل موارد زیر می‌باشد. در فصل دوم پژوهش حاضر، به بررسی اثر پیکر کوانتمی بر ترازهای انرژی و چگالی حالت‌های الکترونی مواد نیم‌رسانا پرداخته می‌شود. قسمت اول این بخش تحت عنوان ساختار بلوری نیم‌رساناها ، شامل ساختار الماسی و کانی سولفید روی، تقریب جرم مؤثر و نظریه‌ی نواری جامدات است. پس از آن ترازهای انرژی و چگالی حالت‌های نیم‌رسانای کپه‌ای محاسبه شده و چگونگی تغییرات چگالی با انرژی محاسبه و ترسیم شده است. در قسمت آخر همراه با معرفی انواع اتصالات ناهمسان[۳۸] و ساختارهای نا همسان، بر آمدگی‌ها و فرو رفتگی‌های نوار رسانش و ظرفیت در محل اتصال ناهمسان $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ محاسبه می‌شود. سپس سه نوع اصلی سیستم‌های کوانتمی نیم‌رسانا (چاه ها، سیم‌ها و نقطه‌های کوانتمی) معرفی کرده، ترازهای انرژی و چگالی حالت‌های آنها و همچنین چگونگی تغییرات چگالی حالت‌های آنها بر حسب انرژی را بررسی می‌کنیم.

در فصل سوم ترازهای انرژی و انرژی بستگی ناخالصی هیدروژنی در نقطه‌ی کوانتمی بیضی‌گون با پتانسیل محدود محاسبه شده است. یک نقطه‌ی کوانتمی بیضی‌گون با سطح مقطع دایره ای و خروج از مرکز بسیار کوچک در نظر گرفته شده و با تغییر متغییر مناسب، نقطه‌ی بیضی‌گون را به یک نقطه‌ی کروی هم حجم با آن تبدیل نموده ایم. سپس با نوشتن هامیلتونی در مختصات جدید و استفاده از روش اختلال غیر تبهگن[۳۹] معادله‌ی شرودینگر را در تقریب جرم مؤثر حل کرده، ترازهای انرژی الکترون آزاد و ناخالصی هیدروژنی، محاسبه می‌شود. در آخر نحوه‌ی تغییرات ویژه مقادیر انرژی و همچنین انرژی بستگی ناخالصی هیدروژنی به صورت تابعی از شعاع نقطه محاسبه و ترسیم می‌شود.

فصل چهارم تحت عنوان خواص نوری نقطه‌های کوانتمی ارائه شده است. در این فصل، ابتدا با بهره گیری از قوانین حاکم بر مکانیک کوانتمی، عملگر چگالی[۴۰] تعریف شده، تحول زمانی عناصر ماتریسی آن در پایه‌های هامیلتونی ارائه شده در فصل سوم به‌دست می‌آید. از آنجا که حل دقیق معادله‌ی تحول زمانی ماتریس چگالی برای بیشتر سیستم‌های فیزیکی امکان پذیر نمی‌باشد، با استفاده از روش اختلال، تصحیح مرتبه‌های اول، دوم و سوم عناصر ماتریس چگالی تعیین و به کمک آنها پذیرفتاری‌های مربوطه را محاسبه می‌کنیم. در ادامه با فرض این که نوار رسانش نقطه‌ی کوانتمی دارای دو زیر نوار فعال است، پذیرفتاری الکتریکی خطی و غیر خطی

۳۸- Heterojunctions
۳۹- Non-Degenerate Perturbation Theory
۴۰- Density Operator

و در نتیجه تغییرات ضریب جذب و شکست خطی و غیر خطی وابسته به گذار بین این دو زیر نوار را به‌دست می‌آوریم. در نهایت، تغییرات ضرایب جذب و شکست را به صورت تابعی از انرژی فوتون فرودی ترسیم نموده، اثراتی از قبیل، اندازه‌ی شعاع نقطه، میزان غلظت آلومینیم، شدت نور فرودی و همچنین بزرگی خروج از مرکز بیضی را بر ضرایب مورد نظر بررسی می‌کنیم.

در فصل پنجم، نتایج ناشی از مطالعات و بررسی‌های صورت گرفته بر نقطه‌ی کوانتمی در این رساله را دسته بندی نموده و همچنین پیشنهادهایی برای ادامه‌ی کار در این زمینه ارائه کرده ایم.