



دانشگاه شاهرود

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

(حالت جامد)

مطالعه انرژی بستگی و جذب نوری ناخالصی‌های دهنده در چاههای کوانتومی

GaAs - GaAlAs

از:

مسعوده ملکی

استاد راهنما:

دکتر حسین پناهی

استاد مشاور:

دکتر حمید رحیم پور

۱۳۸۶ / ۷ / ۲۳

دی‌ماه ۱۳۸۵



۲۹۸۴۲

تقدیم به دوست عزیزم آتیہ عموپور

در اینجا لازم می‌دانم از زحمات بی‌دریغ استاد گرامی‌ام، آقای دکتر پناهی تشکر کنم، از پدر و مادر عزیزم، به ویژه مادرم که موفقیت‌های خود را تا به امروز مدیون فداکاری ایشان می‌دانم، ممنونم. از همراه و پشتیبان همیشگی‌ام، همسرم، به واسطه همکاری‌های صمیمانه‌اش در مراحل مختلف انجام پایان‌نامه تشکر می‌کنم.

فهرست عناوین

۱	فصل اول
۱.....	۱-۱ مقدمه
۶	فصل دوم: مفاهیم پایه
۶.....	۱-۲ مفاهیم اساسی در بلورها
۹.....	۲-۲ نوارهای انرژی
۱۱.....	۳-۲ طبقه‌بندی مواد جامد
۱۳.....	۴-۲ تقریب جرم موثر
۱۵.....	۵-۲ نیمه‌رساناهای با گاف انرژی مستقیم و غیر مستقیم
۱۷.....	۶-۲ ساختارهای چندگانه
۲۱.....	۷-۲ چاه‌های پتانسیل کوانتومی نوع I و II
۲۲.....	۸-۲ گالیم آرسناید (GaAs) و ساختار نواری آن
۲۵.....	۹-۲ بستگی گاف انرژی به فشار و دما
۲۷.....	۱۰-۲ ناخالصی
۳۰.....	۱۱-۲ جذب زوج الکترون - حفره آزاد
۳۷	فصل سوم: اتم‌های دهنده در چاه کوانتومی
۳۷.....	۱-۳ دهنده‌ها و پذیرنده‌ها در ماده کپه‌ای
۳۹.....	۲-۳ انرژی بستگی در یک ساختار چندگانه
۴۳.....	۳-۳ تابع موج آزمون دوبعدی
۴۷.....	۴-۳ تابع موج آزمون سه‌بعدی
۵۰.....	۵-۳ انرژی بستگی حالت پایه و حالت برانگیخته در چاه‌های کوانتومی $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$
۵۶.....	۶-۳ تئوری جذب و کاربرد آن برای اتم‌های دهنده کم عمق
۶۱	فصل چهارم: تاثیر فشار هیدرواستاتیکی

۶۱.....	اتم‌های دهنده در چاه کوانتومی $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ در حضور فشار هیدرواستاتیکی	۱-۴
۶۱.....	تأثیر عدم تطابق ثابت دی‌الکتریک و جرم موثر در سد و چاه	۲-۴
۶۴.....	تأثیر غیرسه‌موی در نظر گرفتن باند رسانش	۳-۴
۶۴.....	تأثیر فشار هیدرواستاتیکی روی هامیلتونی سیستم	۴-۴
۷۲	فصل پنجم: نتیجه‌گیری و پیشنهادات	
۷۲.....	خلاصه و نتیجه‌گیری:	۱-۵
۷۳.....	پیشنهادات:	۲-۵
۷۴	منابع	
۷۶	پیوست اول- محاسبه انتگرال‌های I_j در حالت ۲ بعدی	
۷۹	پیوست دوم- محاسبه انتگرال‌های I_j در حالت ۳ بعدی	
۸۲	پیوست سوم- نمونه‌هایی از محاسبات	
۸۲.....	محاسبات مربوط به انرژی بستگی	پ ۱-۳
۸۸.....	محاسبات مربوط به عناصر ماتریس گذار	پ ۲-۳
۹۴.....	محاسبات مربوط به طیف جذب	پ ۳-۳

فهرست اشکال

- شکل ۱-۱ نمایش طرحواره ماده کپهای، یک چاه کوانتومی، یک سیم کوانتومی و یک نقطه کوانتومی. طول محبس Z_c از ثابت شبکه اتمی بلور بزرگتر است، اما به اندازه کافی، برای اینکه اثرهای حبس کوانتومی اهمیت یابند، کوچک است. ۳.....
- شکل ۱-۲ یک نمایش طرحواره‌ای از آرایش اتم‌ها (الف) در یک جامد بلوری و (ب) در یک جامد بی‌شکل. دایره‌های خالی و نقطه‌ها دو نوع مختلف یون‌های شبکه را نشان می‌دهند. ۶.....
- شکل ۲-۲ (الف) شبکه براونی وجه مرکز دار، (ب) ساختار الماس و (ج) ساختار بلور زینک بلاند. ۷.....
- شکل ۳-۲ یک شبکه دوبعدی با شش اتم در بلور پایه. منطقه $ABCD$ یک سلول واحد ابتدائی و منطقه $EFGHIJ$ نوع دیگری از یک سلول ابتدایی به نام سلول ویگنر-سیتز است. اگر پایه از اتم‌های مشابه مانند شکل داخل مربع الف تشکیل شده باشد شبکه دارای تقارن معکوس است. اگر اتم‌های پایه مانند شکل داخل مربع (ب) مشابه نباشد، تقارن معکوس وجود نخواهد داشت. ۸.....
- شکل ۴-۲ طرحواره پتانسیل تناوبی شبکه. ۹.....
- شکل ۵-۲ طرحواره ترازهای انرژی (الف) در اتم سدیم آزاد، (ب) ترکیبی از دو اتم سدیم و (ج) ترکیبی از تعداد زیادی اتم که سدیم جامد را تشکیل می‌دهد. ۱۰.....
- شکل ۶-۲ نوار انرژی در یک بلور. ۱۱.....
- شکل ۷-۲ طرحواره نوار انرژی برای (الف) یک فلز مانند سدیم Na ، (ب) یک عایق مانند نمک طعام $NaCl$ و (ج) یک نیمه‌رسانا مانند $GaAs$. ۱۲.....
- شکل ۸-۲ نمایش نوارها با جرم‌های موثر مختلف، (الف) نوار دارای جرم موثر مثبت کوچک است، (ب) نوار دارای جرم موثر مثبت بزرگی است و (ج) نوار دارای جرم موثر منفی است. ۱۴.....
- شکل ۹-۲ نمایش نیمه‌رساناهای (الف) با گاف مستقیم و (ب) با گاف غیر مستقیم. ۱۵.....
- شکل ۱۰-۲ نوارهای انرژی یک ذره منفرد برای نوار رسانش و ظرفیت در نزدیکی مرکز اولین منطقه بریلوئن به‌طور نمایشی برای یک نیمه‌رسانای ایده‌آل با گاف مستقیم به‌صورت تابعی از بردار موج k . ۱۶.....
- شکل ۱۱-۲ نمایش یک ساختار چاه کوانتومی منفرد. ۱۸.....
- شکل ۱۲-۲ نمایش یک ساختار چاه کوانتومی چندتایی. ۱۹.....
- شکل ۱۳-۲ نمایش طرحواره‌ای یک ساختار مرکب از دو چاه پتانسیل جفت شده. ۲۰.....
- شکل ۱۴-۲ نمایش طرحواره (الف) یک چاه کوانتومی نیمه‌رسانای نوع اول (I) و (ب) و (ج) دو نمونه از ساختار نوع دوم (II) ... ۲۱.....
- شکل ۱۵-۲ ساختار نوری $GaAs$. ۲۳.....
- شکل ۱۶-۲ گسترش ساختار $GaAs$ در نزدیکی $k=0$ ، شامل جفت‌شدگی اسپین مدار. ۲۳.....
- شکل ۱۷-۲ شکافتگی تراز انرژی اتمی برای یک ترکیب دوتایی مانند $GaAs$. ۲۴.....
- شکل ۱۸-۲ بستگی گاف انرژی $GaAs$ به دما. ۲۶.....
- شکل ۱۹-۲ صفحه شبکه $GaAs$ با جایگزینی Se به جای اتم As . ۲۷.....
- شکل ۲۰-۲ موضع انرژی یایی تراز بخشنده نسبت به لبه‌های نوار. ۲۸.....
- شکل ۲۱-۲ صفحه شبکه‌ای $GaAs$ ، یک اتم Zn با جایگزینی یک اتم Ga . ۲۸.....
- شکل ۲۲-۲ موضع انرژی یایی تراز پذیرنده نسبت به لبه‌های نوار. ۲۹.....
- شکل ۲۳-۲ حالت‌های بخشنده و پذیرنده در گاف ممنوع. ۲۹.....
- شکل ۲۴-۲ (الف) انتقال بین دو تراز انرژی مجزا، (ب) انتقال بین دو نوار انرژی. ۳۲.....
- شکل ۱-۳ نمایش طرحواره یک اتم دهنده در یک نیمه‌رسانای کپهای. ۳۸.....
- شکل ۲-۳ نمایش طرحواره تاثیر پهنای چاه کوانتومی روی تابع موج اتم دهنده. ۳۹.....
- شکل ۳-۳ نمایش طرحواره تاثیر مکان اتم دهنده در چاه کوانتومی روی تابع موج. ۴۰.....

- شکل ۳-۴ انرژی کل الکترون تحت تابعی از پارامتر وردش λ با استفاده از روش وردشی ۴۳
- شکل ۳-۵ انرژی کل الکترون در یک چاه کوانتومی $CdTe$ ، 60 \AA که توسط سد $CdMnTe$ احاطه شده، در حضور یک اتم دهنده ۴۴
- شکل ۳-۶ انرژی بستگی اتم دهنده خنثی در چاه کوانتومی $CdTe$ ، 60 \AA تحت تابعی از موقعیت اتم دهنده ۴۵
- شکل ۳-۷ شعاع بوهر بر حسب موقعیت اتم دهنده در چاه کوانتومی $CdTe$ ، 60 \AA ۴۵
- شکل ۳-۸ انرژی یک الکترون در چاه کوانتومی در حضور اتم دهنده در مرکز چاه و در نبود آن بر حسب پهنای چاه ۴۶
- شکل ۳-۹ انرژی بستگی یک اتم دهنده خنثی در مرکز چاه بر حسب پهنای چاه ۴۶
- شکل ۳-۱۰ اختلاف انرژی کل بین حالت‌های دوبعدی و سه‌بعدی بر حسب موقعیت ناخالصی در چاه $CdTe$ ۴۷
- شکل ۳-۱۱ تابع موج الکترون Ψ برای موقعیت‌های اتم دهنده روی محور سمت راست ۴۸
- شکل ۳-۱۲ مقایسه بین تابع موج کل الکترون $\Psi(x)$ و تابع آزمون $\chi(x)$ برای اتم دهنده در ۳ موقعیت مختلف ۴۹
- شکل ۳-۱۳ انرژی بستگی اتم دهنده در چاه کوانتومی $GaAs-GaAlAs$ بر حسب پهنای چاه برای ۳ ارتفاع سد مختلف ۴۹
- شکل ۳-۱۴ شعاع بوهر بر حسب پهنای چاه برای اتم دهنده در مرکز چاه کوانتومی $GaAs-GaAlAs$ ۵۰
- شکل ۳-۱۵ تغییرات انرژی بستگی حالت پایه و چند حالت برانگیخته الکترون برای اتم دهنده در گوشه و مرکز چاه کوانتومی $GaAs-GaAlAs$ بر حسب پهنای چاه برای $x=0.3$ ۵۲
- شکل ۳-۱۶ تغییرات انرژی بستگی حالت $2p_x$ الکترون برای اتم دهنده در گوشه و مرکز چاه کوانتومی $GaAs-GaAlAs$ بر حسب پهنای چاه برای $x=0.3$ ۵۳
- شکل ۳-۱۷ تغییرات انرژی بستگی حالت $1s, 2p_x, 2p_y, 3p_x$ الکترون برای سه پهنای $12.5nm, 15nm, 21nm$ در چاه کوانتومی $GaAs-GaAlAs$ بر حسب مکان ناخالصی برای $x=0.3$ ۵۴
- شکل ۳-۱۸ تغییرات شعاع بوهر حالات $1s, 2s, 2p_x, 3p_x, 3s$ الکترون بر حسب پهنای چاه کوانتومی $GaAs-GaAlAs$ برای ناخالصی در گوشه چاه و $x=0.3$ ۵۵
- شکل ۳-۱۹ تغییرات انرژی بستگی حالات $1s, 2s, 2p_x, 3p_x, 3s$ الکترون بر حسب شعاع بوهر در چاه کوانتومی $GaAs-GaAlAs$ برای ناخالصی در گوشه چاه و $x=0.3$ ۵۶
- شکل ۳-۲۰ مربع عناصر ماتریس گذار بین حالت‌های $1s \rightarrow 2s$ برای قطبش در راستای محور z و $1s \rightarrow 2p_x, 1s \rightarrow 3p_x$ برای قطبش در راستای محور x بر حسب موقعیت اتم دهنده در چاه ۵۹
- شکل ۳-۲۱ ضریب جذب برای پهنای مختلف چاه کوانتومی $GaAs-GaAlAs$ تحت تابعی از انرژی فوتون برای نور تابشی قطبیده در راستای x ، شامل دو گذار $1s \rightarrow 2p_x, 1s \rightarrow 3p_x$ ۶۰
- شکل ۴-۱ انرژی حالت پایه الکترون بر حسب پهنای چاه $GaAs-GaAlAs$ در حالت جرم ثابت (دایره‌های توپر) و جرم متغیر (دایره‌های توخالی) برای چندین تجمع آلومنیوم ($x=0.1, 0.2, 0.3, 0.4$) ۶۳
- شکل ۴-۲ اختلاف انرژی حالت پایه بین دو حالت جرم ثابت و متغیر بر حسب پهنای چاه ۶۴
- شکل ۴-۳ نمودار تغییرات انرژی حالت پایه تحت تابعی از پهنای چاه در حضور اتم ناخالصی در مرکز و $x=0.3$ ۶۴
- شکل ۴-۴ تغییرات انرژی بستگی حالت پایه در حضور ناخالصی بر حسب پهنای چاه $GaAs$ برای $x=0.1, 0.3$ با در نظر گرفتن باند رسانش سهموی (خطوط ممتد) و با در نظر گرفتن باند رسانش غیرسهموی (خط تیره) ۶۵
- شکل ۴-۵ مقایسه تغییرات انرژی حالت پایه الکترون بدون حضور ناخالصی با انرژی حالت پایه و چند حالت برانگیخته الکترون در حضور ناخالصی در مرکز بر حسب فشار و پهنای چاه 100 \AA ۶۸
- شکل ۴-۶ تغییرات انرژی بستگی حالت پایه و چند حالت برانگیخته الکترون در چاه در حضور ناخالصی در مرکز بر حسب فشار و در پهنای چاه 100 \AA ۶۹

- شکل ۴-۷ انرژیهای بستگی یک ناخالصی دهنده با توابع هیدروژن گونه حالت پایه و حالت برانگیخته $(3P_x, 2P_x, 2s, 1s)$ که به صورت تابعی از پهناى یک چاه کوانتومی $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ در جهت رشد لایه و برای دو موقعیت اتم ناخالصی در مرکز و لبه چاه و همچنین برای دو فشار هیدرواستاتیکی صفر و ده کیلوپار..... ۷۰
- شکل ۴-۸ تغییرات انرژی بستگی بر حسب موقعیت اتم دهنده در چاه کوانتومی $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ برای دو فشار هیدرواستاتیکی صفر و ۱۰ کیلوپار..... ۷۰
- شکل ۴-۹ تغییرات پارامتر وردش نسبت به مکان ناخالصی در چاه در دو فشار صفر و ۱۰ کیلوپار..... ۷۱
- شکل ۴-۱۰ مربع عناصر ماتریس گذار بر حسب مکان ناخالصی در چاه در دو فشار صفر و $10Kbar$ ۷۲

فهرست جدول ها

جدول ۱-۲ خلاصه‌ای از $\left(\frac{\partial E_g}{\partial P}\right)_T$ و $\left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_p$ و بعضی از پارامترهای دیگر برای چند نیمه‌رسانا ۲۷

**مطالعه انرژی بستگی و جذب نوری ناخالصی های دهنده در چاه های
کوانتومی $GaAs - GaAlAs$**

با استفاده از روش وردشی و تقریب جرم موثر، انرژی بستگی دهنده های کم عمق در چاه کوانتومی $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ به دست آورده می شود. انرژی های بستگی مربوط به حالت پایه $1s$ و بعضی از حالات برانگیخته از جمله $2s, 2p_x, 2p_y, 3p_x, 3s$ تحت تابعی از پهنا چاه و موقعیت ناخالصی در چاه به دست آورده می شود. ملاحظه می شود که با افزایش پهنا چاه و دور شدن ناخالصی از مرکز چاه برای $2p_x, 2p_y, 2s, 1s$ و $3s$ انرژی بستگی کاهش می یابد. اما $2p_x$ رفتار نسبتاً متفاوتی از خود نشان می دهد. این رفتار متفاوت در حالت $2p_x$ ناشی از رقابت بین مکان ناخالصی و پهنا چاه و نقش تابع موج شعاعی می باشد. همچنین عناصر ماتریس گذار برای بعضی از گذارها نسبت به موقعیت ناخالصی در چاه محاسبه می شود که در توافق با کارهای انجام شده می باشد و طیف جذب گذارها به دست آورده می شود. در ادامه تاثیر فشار هیدرواستاتیکی روی انرژی بستگی چندین حالت برانگیخته و همچنین تاثیر آن روی عناصر ماتریس گذار بررسی می شود.

واژه های کلیدی:

اتم دهنده، چاه کوانتومی، جذب نوری، ناخالصی، روش وردشی، انرژی بستگی

Abstract

Study of binding energy and optical absorption donor impurities in GaAs-GaAlAs quantum wells

Shallow donors binding energy in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum well are calculated by using a variational technique within the effective mass approximation. Binding energies of ground state 1s and some excited states like 2s, 2p_x, 2p_z, 3p_x, 3s are calculated as functions of quantum well width and impurity position in the well. It is seen with increasing of well width and impurity distance from center of the well, 1s, 2s, 2p_x, 3p_x, 3s binding energies decrease. but 2p_z shows different behaviour. This different behaviour in 2p_z state is because of competition between impurity position and well width and role of radial wave function. Also transition matrix elements for some transitions are calculated as function of impurity position in the well, which is agree with other works which has been done, and transitions absorption spectra are gained. At following, effect of hydrostatic pressure on some excited states binding energy and its effect on the transition matrix elements are studied.

Key words:

Donor, Quantum well, Optical absorption, Impurity, Variational method, Binding energy

۱-۱ مقدمه

بی شک قرن بیست و یکم قرن انقلاب الکترونیک- نوری و صنایع وابسته به آن مانند مخابرات و کامپیوترهای نوری است. کاربردهای بیشمار قطعات نیمه‌رسانای^۱ نوری در این صنایع به عنوان قلب این ابزارها باعث گردیده که توجه به خواص نوری مواد جامد به طور چشم‌گیری افزایش پیدا کند.

خواص الکترونیکی نیمه‌رساناها، بر مبنای تاثیر اختراع ترانزیستور در اوایل سالهای ۱۹۵۰، به صورت یکی از مباحث مهم در تحقیقات و مهندسی درآمده است. حاصل این تحقیقات باعث شد که انقلابی در علوم الکترونیک با موارد کاربردی بیشمار قطعات الکترونیکی حالت جامد به وجود آید. به طور مثال لیزر نیمه‌رسانا، مثال خوبی است برای درک اینکه، بدانیم خواص الکترونیکی و نوری نیمه‌رساناها به هم نزدیک و مربوط هستند. در اوایل سالهای ۱۹۶۰ وقتی که معلوم شد در اثر تزریق حاملهای بار در دو طرف یک پیوند $p-n$ و ترکیب مجدد این حاملها گسیل القایی تابش رخ می‌دهد، ساخت لیزر نیمه‌رسانا امکان‌پذیر شد. اگر بخواهیم فرآیند گسیل نور را درک کنیم، ابتدا لازم است خواص الکترونیکی حاملهای بار متحرک، یعنی الکترونها را در نیمه‌رسانا مطالعه کنیم. البته واضح است که باید پاسخ نوری نیمه‌رسانا را نیز به طور کامل درک کرده باشیم. مثالهای دیگری که ارتباط بسیار نزدیک خواص نوری و الکترونیکی نیمه‌رساناها را نشان می‌دهند، شامل آشکارسازهای نوری تمام جامد و سوئیچهای الکترونوری و یا تمام نوری می‌باشند. می‌توان خصوصیت نیمه‌رسانا را به خواص الکترونیک آن مربوط کرد. به عبارت دیگر مشخصه‌های جذب و تابش نور به طور خیلی اساسی توسط ساختار نواری ماده معین می‌شوند و به طور خیلی مشخص وابسته به گاف انرژی، یعنی تفاوت انرژی بین نوار ظرفیت^۲ (به لحاظ انرژی بالاترین نواری که کاملا توسط الکترونها اشغال شده است) و نوار رسانش^۳ (اولین نوار بالای نوار ظرفیت که به طور جزئی و یا به طور کامل خالی باشد) می‌باشد، همچنین فرآیند اساسی جذب در یک نیمه‌رسانا به صورت انهدام یک کوانتوم نور و به طور همزمان ارتقای یک الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش است. در نتیجه با کندن الکترون توسط فوتون،

¹ Semiconductor

² Valence band

³ Conduction band

حفره‌ای در نوار ظرفیت و یک الکترون در نوار رسانش ایجاد خواهد شد. این فرآیند را جذب فوتون و ایجاد یک زوج الکترون - حفره می‌نامیم. اگر اثر جذب کولنی بین الکترونها نوار رسانش و حفره های نوار ظرفیت را در نظر بگیریم آنگاه به جای یک زوج الکترون - حفره آزاد یک زوج الکترون حفره مقید داریم که اکسیتون^۱ نام دارد. با در نظر گرفتن اثرات اکسیتونی جذب فوتون در انرژیهای کمتر از باند گاف نیز رخ می‌دهد. در محاسبات مربوط به جذب که در فصل چهارم بررسی شده‌اند ما این اثرات را در نظر نگرفته‌ایم.

خواص نوری نیمه‌رساناها در حضور یک نیروی خارجی نیز موضوع مورد توجه در سالهای اخیر بوده است. برای مثال، وقتی که یک میدان الکتریکی مستقیم در عرض یک ماده اعمال شود، جذب لبه نوار به صورت قابل توجهی تغییر می‌کند و قله تشدید در جذب اکسیتون پهن تر می‌شود.

نیمه‌رساناها رفتار غیرخطی نیز از خود نشان می‌دهند، یعنی ثابت جذب و ضریب انکسار در ماده ثابت نبوده و به صورت تابعی از شدت نور تحریک‌کننده تغییر می‌کنند. در حالت کلی، تغییرات طیف جذبی نیمه‌رسانا را که در نتیجه تحریک نوری توسط یک باریکه قوی صورت می‌گیرد، به عنوان خواص غیر خطی نوری جذبی^۲ می‌شناسیم.

بعضی از کاربردهای جالب نیمه‌رساناها برای استفاده در پروژه‌های نوری و الکترونیکی بر این حقیقت استوار است که رشد این مواد را می‌توان به گونه‌ای دستکاری کرد که مجموعه‌ای از مواد تازه با ابعاد بسیار کوچک و خواص قابل پیش‌بینی به دست آید. پیشرفت‌های اخیر در روش‌های رشد بلور باعث شده است که ساختار بلورهایی با ابعاد نانومتر^۳، که آنقدر کوچک هستند و خواص نوری و الکترونیکی آنها در مقایسه با حالت بلور کپه‌ای^۴ آنها بسیار متفاوت است، تحقق یابد. در این ساختارهای نانومتری، توابع موج مکانیک کوانتومی الکترون‌ها و حفره‌ها در داخل ماده محبوس بوده و موجب پایداری اثرهایی به نام اثرهای محبس کوانتومی^۵ می‌شوند. رایج‌ترین این ساختارهای نانومتری نیمه‌رسانا، چاه‌های کوانتومی^۶ هستند که در آن الکترون‌ها در یک بعد از فضا محبوس هستند. چاه‌های کوانتومی نیمه‌رسانا را می‌توان با روشهای مختلف مانند روش برآرایی باریکه مولکولی^۷ به دست آورد. در این روش چندین لایه از $GaAs$ در میان لایه‌هایی از نیمه‌رسانایی با گاف انرژی پهن‌تر مانند $Ga_{1-x}Al_xAs$ با غلظت آلومینیوم آلائیده در آن در حدود $0 < x < 0.4$ رشد داده می‌شود.

¹ Exciton

² Absorptive optical nonlinearities

³ Semiconductor nano structure

⁴ Bulk

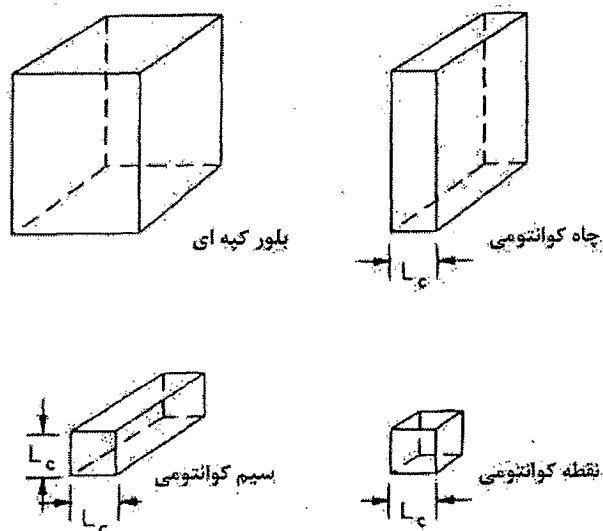
⁵ Quantum confinement

⁶ Quantum wells

⁷ Molecular beam epitaxy

علاوه بر حبس حامل در یک بعد فضایی مانند ساختارهای چاه کوانتومی، محبس قویتر نیز امکان پذیر است. اگر محبس دوبعدی را در نظر بگیریم، این ساختار، ساختار سیم کوانتومی^۱ نامیده می شود و اگر محبس کوانتومی در هر سه بعد فضایی وجود داشته باشد آن وقت ساختار نقاط کوانتومی^۲ را خواهیم داشت.

در شکل ۱-۱ این ساختارها به طور طرحواره نمایش داده شده اند و با ساختارهای کپهای و چاه کوانتومی مقایسه شده اند.



شکل ۱-۱ نمایش طرحواره ماده کپهای، یک چاه کوانتومی، یک سیم کوانتومی و یک نقطه کوانتومی. طول محبس L_c از ثابت شبکه اتمی بلور بزرگتر است، اما به اندازه کافی، برای اینکه اثرهای حبس کوانتومی اهمیت یابند، کوچک است [۲۲].

فهم خواص سطوح انرژی ناخالصی در ساختارهای نیمه رسانا با ابعاد کوچکتر موضوع قابل توجهی است که کاربردهای تکنولوژیکی در وسایل الکترونیکی دارند. در این نانوساختارها، علاوه بر اندرکنش کولنی، ناخالصیها تحت تاثیر پتانسیل محبس قرار دارند. وقتی ابعاد سیستم کاهش می یابد اثر این پتانسیل محبس مهمتر می شود. چاههای کوانتومی $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ سیستمهایی هستند که زیاد بررسی شده اند و تاثیر ناخالصی در این چاهها مورد توجه قرار گرفته است. بستارد^۳ اولین کسی بود که به این موضوع توجه کرد. او یک چاه کوانتومی با سد نامتناهی در نظر گرفت و حالت های ناخالصی^۴ هیدروژن گونه را با استفاده از روش وردشی مطالعه کرد. او دریافت که انرژی بستگی با موقعیت ناخالصی در چاه و ضخامت چاه تغییر می کند. در ادامه بستارد خواص اپتیکی مربوط به ناخالصیها را با در نظر گرفتن سد نامتناهی در سال ۱۹۸۱ ارائه کرد [۱].

^۱ Quantum wire

^۲ Quantum dots

^۳ Bastard

^۴ Impurity

در سال ۱۹۸۳، چادوری و باجاج^۱ تاثیر غیرسهموی بودن باند رسانش روی سطح انرژی اتم‌های دهنده در ساختارهای چاه کوانتومی $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ را مورد بررسی قرار دادند. آنها نتیجه گرفتند که برای همه پهناهای چاه با در نظر گرفتن این تاثیر، انرژیهای بستگی بزرگتری منجر می‌شود [۲].

کار بستارد با جزئیات بیشتری توسط اولیویرا^۲ و همکارانش در سال ۱۹۸۹ ادامه پیدا کرد [۳]. اولیویرا و همکارانش طیف جذب و فتولومیناسانس^۳ مربوط به دهنده‌ها و پذیرنده‌های کم عمق را در چاه‌های کوانتومی $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ مورد توجه قرار دادند. همچنین کارهای تجربی زیادی نیز در این زمینه انجام شده است. در سال ۱۹۸۲، میلر^۴ و همکارانش خواص طیف فتولومیناسانس مربوط به پذیرنده‌ها در چاه‌های کوانتومی $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ و در ابرشبه‌ها را گزارش دادند [۴]. خواص مربوط به دهنده‌ها در چنین سیستم‌هایی توسط شونوبروک^۵ و همکارانش در سال ۱۹۸۴ [۵] و هلم^۶ و همکارانش در سال ۱۹۹۱ بررسی و مطالعه شد [۶]. خواص نوری-مغناطیسی ساختارهای نیمه‌رسانا با استفاده از تکنیک‌های عملی مانند مگنتولومیناسانس^۷ بین باندها و تشدید سیکلوترون که باعث اعمال میدان مغناطیس به سیستم می‌شود توسط بروزاک^۸ و همکارانش و دوفیلد^۹ و همکارانش در سال‌های ۱۹۸۷ تا ۱۹۹۰ بررسی شد [۷ و ۸].

در سال ۱۹۸۹، فرازولی^{۱۰} و همکارانش تاثیر عدم تطابق جرم موثر و ثابت دی‌الکتریک را روی انرژی بستگی اتم‌های ناخالصی در چاه کوانتومی $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ مورد بررسی قرار دادند. آنها پی‌بردند که با در نظر گرفتن تاثیر عدم تطابق جرم موثر و ثابت دی‌الکتریک برای همه پهناهای چاه، انرژی بستگی بزرگتری به دست می‌آید [۹].

در دهه ۱۹۹۰ بیشتر توجه فیزیکدانان به سمت القاء یک اختلال خارجی مثل میدان الکتریکی یا میدان مغناطیسی روی سیستم چاه کوانتومی $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ در حضور اتم دهنده در داخل چاه جلب شد. اولیویرا و همکارانش یک میدان الکتریکی ثابت به سیستم اعمال کردند و مشاهده کردند که با افزایش شدت میدان، طیف جذب در انرژی‌های پائین‌تری رخ می‌دهد. کار اولیویرا توسط سایرین دنبال شد [۱۰-۱۳].

¹ Chaudhuri and Bajaj

² Oliveira

³ Photoluminescence

⁴ Miller

⁵ Shanabrook

⁶ Helm

⁷ Magnetoluminescence

⁸ Brozak

⁹ Duffield

¹⁰ Fraizzoli

در سال ۱۹۹۴، الابیسی^۱، انرژی بستگی حالت پایه الکترون در حضور ناخالصی را تحت تاثیر فشار هیدرو استاتیکی و در دماهای پایین محاسبه کرد [۱۴].

او دریافت که انرژی بستگی اتم دهنده در دماهای پایین به فشار وابسته است. در سالهای اخیر تاثیر فشار هیدرواستاتیکی روی انرژی بستگی ناخالصی درون چاه کوانتومی $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ و تاثیر آن روی طیف جذبی مربوط به ناخالصی بررسی و مطالعه شده است. همچنین تاثیر فشار هیدرواستاتیکی و میدان الکتریکی به طور همزمان روی انرژی بستگی سیم‌ها و چاه‌های کوانتومی دوگانه مورد توجه قرار گرفته است [۱۵-۲۱].

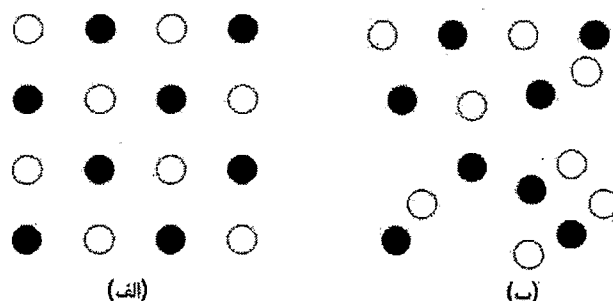
در تمام این مقالات تاثیر فشار هیدرواستاتیکی روی انرژی بستگی حالت پایه $1s$ مورد مطالعه قرار گرفته است. بر پایه این کارها و مقالاتی که تاکنون بررسی شده است، در این پایان‌نامه به بررسی انرژی بستگی الکترون در چاه کوانتومی $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ در حضور ناخالصی، برای حالت‌های تحریکی $1s, 2s, 2p_{x,y}, 2p_z, 3p_{x,y}, 3s$ در چاه پرداخته شده است و سپس تاثیر فشار هیدرو استاتیکی روی چندین حالت برانگیخته محاسبه شده است.

ترتیب مطالب به این صورت است که در فصل دوم مفاهیم پایه به طور خلاصه ارائه شده و در فصل سوم با تعریف ناخالصی‌های دهنده و استفاده از روش وردشی و تقریب جرم موثر، انرژیهای بستگی حالت پایه و چندین حالت برانگیخته و تغییرات آن با پهنای چاه و مکان ناخالصی مورد مطالعه قرار گرفته است. تغییرات عناصر ماتریس گذار با توجه به مکان ناخالصی بررسی شده و منحنی جذب آن با توجه به انرژی فوتون رسم شده است. در فصل چهارم اختلال خارجی به صورت نفوذ فشار هیدرواستاتیکی در سیستم اعمال کرده و مجدداً تغییرات انرژی بستگی برای حالت پایه و چند حالت برانگیخته با توجه به فشار محاسبه شده است و در نهایت عناصر ماتریس گذار برای نور با قطبش در راستای x و راستای z در عدم حضور فشار و در حضور فشار با هم مقایسه شده است. در فصل پنجم نیز نتایج حاصله از این پایان‌نامه و پیشنهاداتی برای ادامه کار مطرح شده است. پایان‌نامه با چند پیوست و نمونه‌ای از محاسبات عددی به اتمام می‌رسد.

¹ Elabey

۱-۲ مفاهیم اساسی در بلورها

مواد جامد از حدود 10^{23} اتم در سانتی متر مکعب ساخته شده‌اند. از لحاظ ساختاری به طور کلی آنها را می‌توان به دو شاخه مواد بلوری و مواد بی‌شکل تقسیم کرد. ساختارهای بلوری از آرایش تناوبی اتم‌ها و مولکول‌ها برخوردار هستند (شکل ۱-۲ الف). در حالی که مواد جامد بی‌شکل مانند شیشه‌ها، دارای هیچ نوع تناوب و ساختار منطقی نیستند (شکل ۱-۲ ب).



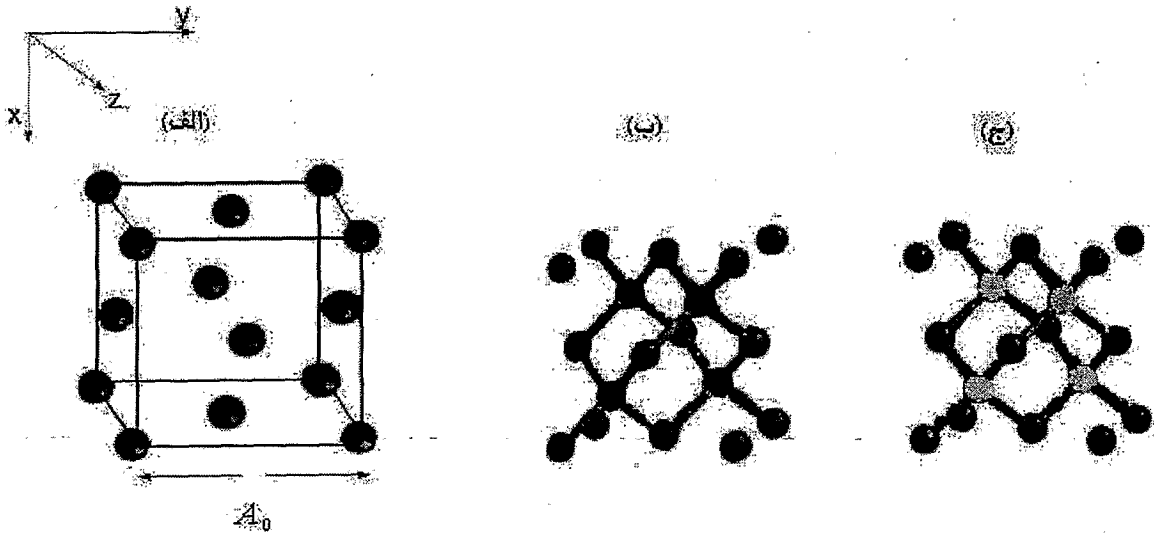
شکل ۱-۲ یک نمایش طرحواره‌ای از آرایش اتم‌ها (الف) در یک جامد بلوری و (ب) در یک جامد بی‌شکل. دایره‌های خالی و نقطه‌ها دو نوع مختلف یون‌های شبکه را نشان می‌دهند.

به هر نقطه از شبکه یک پایه^۱ از اتم‌ها وابسته است. در فلزات ساده تعداد اتم‌ها در یک سلول واحد یا پایه، حداقل یک است. ولی در بعضی از بلورهای آلی به چند هزار نیز می‌رسد. بیشتر نیمه‌رساناها دارای شبکه براوه^۲ مرکز سطحی هستند (شکل ۲-۲ الف). سلول پایه برای مواد مانند Si , Ge , $GaAs$, $AlAs$, InP و غیره شامل دو اتم یکی آنیون در $(1/8, 1/8, 1/8)$ و دومی کاتیون در $(-1/8, -1/8, -1/8)$ به واحد ثابت شبکه (A_0)، می‌شود. برای مواد گروه IV مانند Si , Ge ، اتم‌های پایه اتمی یکسان هستند. بنابراین ساختار بلور الماس می‌باشد (شکل ۲-۲ ب).

¹ Basis

² Bravais

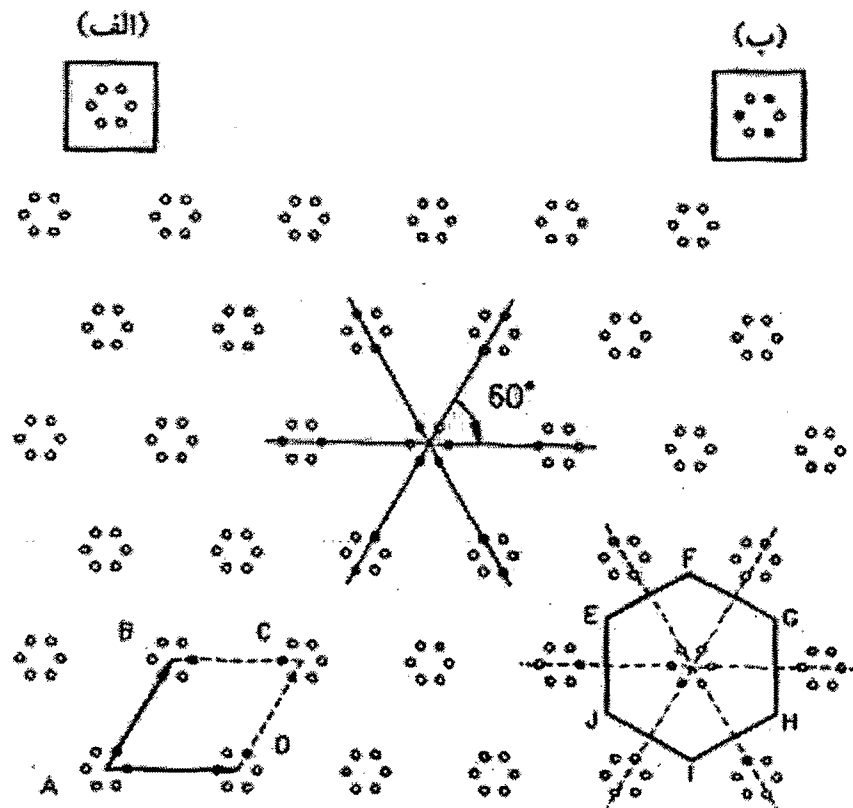
نیمه‌رساناهای ترکیبی گروه $III-V$ و $II-VI$ مثل $GaAs$, InP , $AlAs$, $HgTe$ و $CdTe$ ، ساختار زینک بلاند^۱ نامیده می‌شود (شکل ۲-۲ ج).



شکل ۲-۲ یک نمایش طرحواره‌ای (الف) شبکه براوه مرکز سطحی، (ب) ساختار الماس و (ج) ساختار بلور زینک بلاند [۲۳]

تکرار تناوبی پایه، بلور را به وجود می‌آورد. شکل ۲-۳ مثالی از شبکه بلوری را نشان می‌دهد که در آن هر نقطه شبکه دارای شش اتم است که پایه را تشکیل می‌دهد.

^۱ Zinc blende



شکل ۲-۳ یک شبکه دوبعدی با شش اتم در بلور پایه. منطقه $ABCD$ یک سلول واحد ابتدائی و منطقه $EFGHIJ$ نوع دیگری از یک سلول ابتدایی به نام سلول ویگنر-سیتز است. اگر پایه از اتم‌های مشابه مانند شکل داخل مربع (الف) تشکیل شده باشد شبکه دارای تقارن معکوس است. اگر اتم‌های پایه مانند شکل داخل مربع (ب) مشابه نباشد، تقارن معکوس وجود نخواهد داشت [۲۲].

نقاط شبکه یک بلور را می‌توان توسط یک بردار شبکه بسیط^۱ توصیف کرد:

$$\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \quad (1-2)$$

که در آن n_1 و n_2 و n_3 می‌توانند مقادیر صحیح، $0, \pm 1, \pm 2$ را اختیار کنند. بردارهای $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ سه بردار انتقال اصلی (ابتدائی) هستند. کوچکترین منطقه از بلور را که می‌توان توسط بردار ابتدائی شبکه انتقال داد تا منطقه مشابهی را بسازد، سلول واحد بسیط^۲ می‌نامند. در یک بلور معلوم، چندین سلول ابتدائی ممکن وجود دارند. مثالی برای چنین سلول واحد ابتدائی مساحت $ABCD$ در شکل ۲-۳ است. انتقال پیاپی سلول واحد ابتدائی، تمام حجم بلور را بدون جای خالی و یا روی هم‌افتادگی پر می‌کند.

¹ Primitive lattice vector

² Primitive unit cell