

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

(گرایش نظری)

مطالعه معادله شرودینگر با جرم موثر وابسته به مکان در چاههای کوانتومی

از:

مهناز دوستدار

استادان راهنما:

دکتر حسین پناهی

دکتر سیامک گلشاهی

بهمن 1390

حاصل دو سال و نیم تلاش و زمین خوردن و برخاستن، دو سال و نیم عرق ریزی روح و جسم، درس خواندن های صبح تا شب و گاهی شب تا صبح، این پایان نامه شد و چند تار موی سفید در شقیقه هایم. آن را تقدیم می‌کنم به همه‌ی کسانی که آموختن و کشف، بزرگترین لذت زندگی‌شان است.

فهرست مطالب

1	فصل اول : مقدمه
6	فصل دوم : مفاهیم پایه.....
7	1-2 بلور چیست؟.....
9	2-2 نیمه رسانا چیست؟.....
16	3-2 تقریب جرم موثر.....
18	4-2 چندپیوندی ها، چندساختاری ها و تشکیل چاه کوانتومی.....
22	5-2 درباره ی گالیم آرسناید.....
25	6-2 نیمه رسانای نوع n و نوع p
30	فصل سوم : انواع چاههای کوانتومی و حل معادله شرودینگر.....
31	1-3 چاههای کوانتومی مربعی
31	1-1-3 چاه کوانتومی نامتناهی
34	2-1-3 چاه کوانتومی متناهی
34	1-2-1-3 تک چاه کوانتومی
38	2-2-1-3 چاه کوانتومی دوتایی.....
42	3-1-3 روش شوتینگ.....
45	4-1-3 انرژی بستگی.....
45	1-4-1-3 انرژی بستگی در مواد کپه ای.....
47	2-4-1-3 انرژی بستگی در یک چندساختاری.....
52	3-4-1-3 تابع موج آزمایشی دو بعدی.....
55	4-4-1-3 تابع موج آزمایشی سه بعدی.....
57	5-1-3 تأثیر تغییر شکل پتانسیل و اعمال میدان های الکتریکی و مغناطیسی بر انرژی بستگی.....

فصل چهارم : انرژی بستگی در انواع چاههای کوانتومی با حضور جرم موثر وابسته به مکان.....63

1-4 انرژی بستگی در چاه کوانتومی مربعی.....65

1-1-4 انرژی بستگی در چاه کوانتومی تکی.....65

2-4 انرژی بستگی در چاه کوانتومی V-شکل.....68

3-4 تاثیر میدان مغناطیسی بر انرژی بستگی در انواع چاههای کوانتومی.....73

1-3-4 اعمال میدان مغناطیسی در چاه پتانسیل مربعی.....73

2-3-4 اعمال میدان مغناطیسی در چاه پتانسیل V-شکل.....75

4-4 تغییر جرم موثر و تاثیر آن بر حل معادله شرودینگر و انرژی بستگی در انواع چاههای کوانتومی.....77

1-4-4 اعمال جرم موثر وابسته به مکان در چاه های پتانسیل.....77

2-4-4 تعریف جرم موثر با تابعیت مکانی.....79

3-4-4 انرژی بستگی در چاه کوانتومی مربعی با جرم موثر وابسته به مکان.....80

4-4-4 انرژی بستگی در چاه کوانتومی V-شکل با جرم موثر وابسته به مکان.....84

5-4 تاثیر میدان مغناطیسی بر انرژی بستگی انواع چاههای کوانتومی با جرم موثر وابسته به مکان.....86

1-5-4 تاثیر میدان مغناطیسی بر انرژی بستگی در چاه پتانسیل مربعی در حضور جرم متغیر.....86

2-5-4 تاثیر میدان مغناطیسی بر انرژی بستگی در چاه پتانسیل V-شکل در حضور جرم متغیر.....88

فصل چهارم : نتیجه گیری.....90

1-5 خلاصه و نتیجه گیری.....91

2-5 پیشنهادات.....93

منابع.....94

پیوست الف: روش نیوتن- رافسون.....97

پیوست ب : کد ++C برای محاسبه انرژی الکترون در چاه پتانسیل مربعی بدون حضور اتم دهنده.....98

پیوست ج : کد ++C برای محاسبه انرژی الکترون در چاه پتانسیل مربعی با حضور اتم دهنده.....101

فهرست شکل‌ها

- شکل (1-2) نمایشی از شبکه ی براوه ی مرکز سطحی.....7
- شکل (2-2) ساختارهای بلوری وورترزیت (راست) و زینک بلاند(چپ).....8
- شکل (3-2) توضیح شماتیک مولفه ی هسته ی یونی پتانسیل بلوری در صفحات $\{001\}$ - یک آرایه ی 3بعدی از پتانسیلهای متقارن کروی8
- شکل (4-2) نمایشی از نوارهای انرژی.....9
- شکل (5-2) نمایشی از ساختار نوری جامدات.....11
- شکل (6-2) نمایش نیمه رساناها الف) با گاف مستقیم ب) با گاف غیرمستقیم.....13
- شکل (7-2) ساختار نوار الکترونی بعضی از نیمه رساناها الف) GaAs (گاف مستقیم) ب) Ge (گاف غیرمستقیم).....13
- شکل (8-2) نمایش نوارها با جرم موثرهای مختلف : الف) نوار با جرم موثر مثبت کوچک ب) نوار با جرم موثر مثبت بزرگ ج) نوار با جرم موثر منفی.....17
- شکل (9-2) دو نیمه رسانای مختلف با گاف های نوری متفاوت به هم متصل شده اند و ساختار چندگانه تشکیل داده‌اند.....18
- شکل (10-2) پتانسیل یک بعدی $V(z)$ در نوار رسانش و ظرفیت که در یک ساختار چندگانه ، بین دو ماده ی مختلف اتفاق می افتد (خط چین).....19
- شکل (11-2) پتانسیل یک بعدی $V(z)$ در نوارهای رسانش و ظرفیت برای یک تک چاه کوانتومی نوعی (چپ) و برای یک چاه کوانتومی پله ای (راست).....20
- شکل (12-2) پتانسیل یک بعدی $V(z)$ در نوار رسانش و ظرفیت برای چاههای کوانتومی دوگانه متقارن (چپ) و نامتقارن (راست).....20
- شکل (13-2) پتانسیلهای یک بعدی $V(z)$ در نوار رسانش و ظرفیت برای یک چاه کوانتومی چندتایی یا ابرشبکه.....21
- شکل (14-2) پتانسیل های یک بعدی $V(z)$ در نوارهای رسانش و ظرفیت برای یک تک چاه کوانتومی نوع I (چپ) در مقایسه با نوع II (راست).....21

- شکل (2-15) شبکه ی سولفید روی ZnS..... 23
- شکل (2-16) ساختار گالیم آرسناید در نزدیکی $k=0$ شامل جفت شدگی اسپین-مدار..... 23
- شکل (2-17) شکافتگی تراز انرژی اتمی برای یک ترکیب دوتایی مانند GaAs..... 24
- شکل (2-18) صفحه ی شبکه ی GaAs با جانشینی اتم Se به جای As..... 26
- شکل (2-19) موقعیت تراز دهنده نسبت به لبه های نوار..... 27
- شکل (2-20) صفحه ی شبکه ی GaAs با جانشینی یک اتم Zn به جای Ga..... 28
- شکل (2-21) موقعیت تراز دهنده نسبت به لبه های نوار..... 28
- شکل (2-22) ترازهای دهنده و پذیرنده در گاف ممنوعه..... 29
- شکل (3-1) چاه پتانسیل نامتناهی یک بعدی..... 32
- شکل (3-2) حل های چاه چتانسیل نامتناهی یک بعدی..... 33
- شکل (3-3) سه تراز اول انرژی به ازای پهنای مختلف برای الکترون محبوس در چاه GaAs نامتناهی..... 34
- شکل (3-4) چاه پتانسیل متناهی یک بعدی با توابع موج زوج در هر ناحیه..... 35
- شکل (3-5) سطوح انرژی در تک چاه کوانتومی GaAs با جرم موثر ثابت $m=0.067m_0$ و $V=100 \text{ meV}$ 38
- شکل (3-6) ویژه توابع $\psi(z)$ برای سه تراز اول انرژی در چاه کوانتومی GaAs با پهنای 200 آنگستروم..... 38
- شکل (3-7) چاه کوانتومی دوتایی متقارن..... 38
- شکل (3-8) تابع موج با پارامتر ی فرد..... 44
- شکل (3-9) تابع موج با پارامتر ی زوج..... 45
- شکل (3-10) نمایش شماتیک یک دهنده در نیمه رسانای کپه ای..... 45
- شکل (3-11) نمایش شماتیک اثر پهنای چاه بر تابع موج دهنده..... 47
- شکل (3-12) نمایش شماتیک اثر مکان دهنده بر تابع موج..... 48
- شکل (3-13) انرژی الکترون در چاه کوانتومی به صورت تابعی از پهنای چاه، در حضور دهنده (دایره های توپر) و در غیاب دهنده (دایره های توخالی)..... 54

- شکل (3-14) انرژی بستگی دهنده در چاه کوانتومی به صورت تابعی از پهنای چاه (دهنده در مرکز چاه قرار دارد)....55
- شکل (3-15) تابع موج الکترون Ψ برای مکان‌های مختلف اتم دهنده (محور عمودی سمت راست).....56
- شکل (3-16) انرژی بستگی دهنده در ساختار $GaAs / Ga_{1-x}Al_xAs$ به صورت تابعی از عرض چاه برای غلظت‌های مختلف آلیاژ آلومینیوم x57
- شکل (3-17) ساختار یک چاه پتانسیل V -شکل (الف) در غیاب میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی (ب) در حضور میدان‌ها.....58
- شکل (3-18) انرژی بستگی در چاه کوانتومی V -شکل تحت اعمال میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی برای پهنای مختلف چاه.....59
- شکل (3-19) اثر میدان‌های E و B بر شکل چاه پتانسیل و تابع چگالی احتمال بر حسب مکان مقیاس شده
- 61..... $\vec{z} = \frac{z}{L}$ در حضور $L=40 \text{ \AA}$ و $F=150\text{keV}$ برای $B=0$ (A) $B=15T$ (B) $B=20T$ (C) و $B=25T$ (D).....
- شکل (4-1) انرژی بستگی اتم ناخالصی دهنده در تک چاه کوانتومی مربعی با تابع موج 2 بعدی (خط پر) و 3 بعدی (خط چین).....66
- شکل (4-2) انرژی بستگی اتم ناخالصی دهنده در چاه کوانتومی مربعی، با انتخاب تابع موج آزمایشی دو بعدی به ازای پهنای مختلف چاه برای مکان‌های مختلف دهنده (a) $r_d=0$ (b) $r_d=10$ (c) $r_d=20$ و (d) $r_d=30$ آنگستروم..67
- شکل (4-3) انرژی بستگی اتم ناخالصی دهنده در چاه کوانتومی مربعی، با انتخاب تابع موج آزمایشی سه بعدی به ازای پهنای مختلف چاه برای مکان‌های مختلف دهنده (a) $r_d=0$ (b) $r_d=10$ (c) $r_d=20$ و (d) $r_d=30$ آنگستروم..67
- شکل (4-4) تابع چگالی احتمال الکترون برای مکان‌های مختلف اتم دهنده در چاه کوانتومی مربعی به پهنای 200 آنگستروم با انتخاب تابع موج آزمایشی سه بعدی.....68
- شکل (4-5) انرژی بستگی اتم ناخالصی دهنده در چاه کوانتومی V -شکل، با انتخاب تابع موج آزمایشی دو بعدی به ازای پهنای مختلف چاه برای مکان‌های مختلف دهنده (a) $r_d=0$ (b) $r_d=10$ (c) $r_d=20$ و (d) $r_d=30$ آنگستروم..70
- شکل (4-6) انرژی بستگی اتم ناخالصی دهنده در چاه کوانتومی V -شکل، با انتخاب تابع موج آزمایشی سه بعدی به ازای پهنای مختلف چاه برای مکان‌های مختلف دهنده (a) $r_d=0$ (b) $r_d=10$ (c) $r_d=20$ و (d) $r_d=30$ آنگستروم..70

- شکل (4-7) تابع چگالی احتمال الکترون برای مکان های مختلف اتم دهنده در چاه کوانتومی V-شکل به پهنای 200
- 71..... آنگستروم با انتخاب تابع موج آزمایشی سه بعدی
- شکل (4-8) انرژی بستگی اتم دهنده (واقع در مرکز چاه) به ازای پهنای مختلف چاه پتانسیل مربعی (خط چین) و چاه پتانسیل V-شکل (خط پر) با تابع موج دوبعدی (چپ) و سه بعدی (راست).
- 72..... شکل (4-9) تابع چگالی احتمال الکترون در چاه پتانسیل مربعی (خط چین) و چاه پتانسیل V-شکل (خط پر) با تابع موج دوبعدی (چپ) و سه بعدی (راست).
- 73..... شکل (4-10) انرژی بستگی اتم دهنده (واقع در مرکز چاه) در چاه پتانسیل مربعی در حضور میدانهای 15.0 و 30 تسلا، با تابع موج دوبعدی (چپ) و سه بعدی (راست).
- 74..... شکل (4-11) مقایسه‌ی تاثیر افزایش پهنای چاه با افزایش میدان بر پهن شدگی تابع چگالی احتمال در چاه پتانسیل مربعی با تابع موج سه بعدی.
- 75..... شکل (4-12) انرژی بستگی اتم دهنده (واقع در مرکز چاه) در چاه پتانسیل V-شکل در میدانهای 15.0 و 30 تسلا، با تابع موج دو بعدی (چپ) و سه بعدی (راست).
- 76..... شکل (4-13) مقایسه‌ی تاثیر افزایش پهنای چاه با افزایش میدان بر پهن شدگی تابع چگالی احتمال در چاه پتانسیل V-شکل با تابع موج سه بعدی.
- 76..... شکل (4-14) وابستگی جرم موثر به مکان در گستره‌ی 0 تا 100 آنگستروم برای جرمهای معرفی شده در (4-26) تا (4-29).
- 80..... شکل (4-15) انرژی بستگی اتم ناخالصی دهنده (واقع در مرکز چاه) بر حسب پهنای چاه برای جرم موثر وابسته به مکان (خط چین) و جرم موثر ثابت (خط پر) در چاه پتانسیل مربعی با انتخاب تابع موج دوبعدی (چپ) و سه بعدی (راست).
- 81..... شکل (4-16) تابع چگالی احتمال الکترون برای مکان های مختلف اتم دهنده در چاه کوانتومی مربعی به پهنای 200
- 83..... آنگستروم با انتخاب تابع موج آزمایشی سه بعدی با جرم موثر وابسته به مکان
- شکل (4-17) انرژی بستگی اتم ناخالصی دهنده بر حسب پهنای چاه برای جرم موثر وابسته به مکان، به ازای مکان‌های مختلف اتم دهنده در 10.5 و 15 آنگستروم در چاه پتانسیل مربعی با تابع موج دوبعدی (چپ) و سه بعدی (راست).
- 83.....

- شکل (4-18) انرژی بستگی اتم ناخالصی دهنده (واقع در مرکز چاه) بر حسب پهناي چاه برای جرم موثر وابسته به مکان (خط پر) و جرم موثر ثابت (خط چین) در چاه پتانسیل V-شکل با تابع موج دوبعدی (چپ) و سهبعدی (راست).....84
- شکل(4-19) تابع چگالی احتمال الکترون برای مکان های مختلف اتم دهنده در چاه کوانتومی V-شکل به پهناي 200 آنگستروم با انتخاب تابع موج آزمایشی سهبعدی با جرم موثر وابسته به مکان.....85
- شکل (4-20) انرژی بستگی اتم ناخالصی دهنده بر حسب پهناي چاه برای جرم موثر وابسته به مکان، به ازای مکان های مختلف اتم دهنده در 0،5،10 و 15 آنگستروم در چاه پتانسیل V-شکل با تابع موج دوبعدی (چپ) و سهبعدی (راست)....86
- شکل (4-21) انرژی بستگی اتم دهنده (واقع در مرکز چاه) در چاه پتانسیل مربعی در میدانهای 0،15 و 30 تسلا، با انتخاب جرم موثر وابسته به مکان و تابع موج دو بعدی (چپ) و سهبعدی (راست).....87
- شکل (4-22) انرژی بستگی اتم دهنده (واقع در مرکز چاه) در چاه پتانسیل مربعی بر حسب میدان، با انتخاب تابع موج سهبعدی برای جرم ثابت (خط چین) و متغیر (خط پر).....88
- شکل (4-23) انرژی بستگی اتم دهنده (واقع در مرکز چاه) در چاه پتانسیل V-شکل در میدانهای 0،15 و 30 تسلا، با انتخاب جرم موثر وابسته به مکان و تابع موج دو بعدی (چپ) و سهبعدی (راست).....89
- شکل (4-24) انرژی بستگی اتم دهنده (واقع در مرکز چاه) در چاه پتانسیل V-شکل بر حسب میدان، با انتخاب تابع موج سهبعدی برای جرم ثابت (خط چین) و متغیر (خط پر).....90

فهرست جدول ها

جدول 1-2 خواص الکترونیکی برخی از رساناها در 300K؛ D گاف مستقیم و I گاف غیرمستقیم.....12

جدول 2-2 برخی پارامترهای مهم *GaAs*.....25

جدول (1-4) انرژی حالت پایه ی اتم ناخالصی دهنده در چاه پتانسیل مربعی با جرم های ثابت و متغیر.....82

مطالعه معادله شرودینگر با جرم موثر وابسته به مکان در چاههای کوانتومی

در این پایان نامه، معادله ی شرودینگر با استفاده از روش وردشی در چاههای کوانتومی $GaAs / Ga_{1-x}Al_xAs$ و در حضور جرم موثر وابسته به مکان حل شده است. از حل معادله ی شرودینگر، انرژی بستگی اتم ناخالصی دهنده در چاههای کوانتومی مربعی و V شکل با جرم موثر وابسته به مکان و با انتخاب توابع موج آزمایشی وردشی دوبعدی و سه بعدی محاسبه شده است. هم چنین انرژی بستگی اتم ناخالصی دهنده به ازای مکان های مختلف اتم دهنده در چاه کوانتومی هم برای جرم موثر ثابت و هم برای جرم موثر وابسته به مکان محاسبه شده است و تابع چگالی احتمال حضور الکترون در چاه کوانتومی رسم شده است. اعمال میدان مغناطیسی در راستای عمود بر محور رشد لایه ها باعث افزایش انرژی بستگی شده است که از رسم تابع چگالی احتمال در حضور میدان مغناطیسی می توان دریافت که اعمال میدان باعث مقیدتر شدن ذره داخل چاه کوانتومی می گردد. و در ادامه مقایسه ای بین انرژی بستگی ذره ی با جرم موثر ثابت و ذره ی با جرم موثر وابسته به مکان صورت گرفته است.

واژه های کلیدی:

جرم موثر وابسته به مکان، چاه کوانتومی، انرژی بستگی، اتم دهنده، روش وردشی، تابع موج آزمایشی.

Abstract

Study of Schrödinger equation in quantum wells with position dependent effective mass

In this thesis, Schrödinger equation in $GaAs / Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum wells with position dependent effective mass was solved by use of variational approach. Then binding energy of donor impurity was calculated from solving the Schrödinger equation in square quantum well and V-shaped quantum well with both constant and position dependent effective mass by use of two and three dimensional trial wave functions. The binding energy for various donor positions in quantum well with constant and position dependent effective mass was obtained and probability density function of electron was calculated. By applying the magnetic field (perpendicular to growth direction) the Binding energy was increased and it was found from electron probability density function that the magnetic field makes the electron more confined in quantum well. Finally a comparison between the constant and position dependent effective mass binding energies has been shown.

Key words:

Position dependent effective mass, Quantum well, Binding energy, Donor, Variational approach, Trial wave function.

فصل اول

مقدمه
مقدمه

۱-۱ مقدمه

اکنون در عصر شکوفایی صنایع و ابزارهای الکترونیکی، اهمیت قطعات نیمه رسانا بر انسان قرن بیست و یکم پوشیده نیست. کاربردهای فراوان نیمه رساناها در ابزارهای الکترونیکی و اپتوالکترونیکی باعث شده که در دهه‌های اخیر، توجه ویژه‌ای به این مواد جلب شود و ارزیابی‌های تئوری و تجربی زیادی در این زمینه صورت پذیرد.

انواع لیزرهای چندساختاری^۱ دوتایی که در دستگاه‌هایی مثل پخش لوح فشرده و سیستم‌های مخابراتی به کار می‌روند، ترانزیستورهای کم‌نویز با قابلیت تحرک الکترونی^۲ بالا که در قطعات با کاربرد فرکانس قوی مثل تلویزیون‌های ماهواره‌ای به کار می‌روند [۱] سلول‌های خورشیدی چندساختاری که استفاده‌ی گسترده‌ای در ابزارهای فضایی دارند (ایستگاه فضایی میر^۳ حدود ۱۵ سال برای تامین انرژی خود از سلول‌های خورشیدی چندساختاری *GaAs* استفاده کرده است [۲-۴]) از جمله مثالها و ابزارهایی هستند که در ساختن آنها، از قطعات نیمه‌رسانا بهره گرفته‌اند.

بیشتر مطالعات انجام شده روی سیستم‌های نیمه‌رسانا، درباره‌ی چندساختاری‌های گروه $III-V$ و به ویژه چندساختاری‌های $GaAs / Ga_{1-x}Al_xAs$ است و در واقع، آنچه برای دانشمندان اهمیت دارد، تغییر خواص این چندساختاری‌ها در راستای اهداف صنعتی است.

¹ Heterostructure

² Mobility

³ Mir space station

این چندساختاری‌ها همان ساختارهای پرپودیک هستند که حداقل از دو نیمه رسانا مثل $GaAs$ و $Ga_{1-x}Al_xAs$ تشکیل شده‌اند و این لایه‌ها به صورت یک در میان کنار هم قرار گرفته‌اند. این مدولاسیون فضایی پرپودیک باعث می‌شود که سیستم به طور موثر کم‌بعد^۱ باشد و در نتیجه خواص الکترونیکی و اپتوالکترونیکی آن متفاوت با بلورهای حجیم^۲ باشد. مطالعات نشان داده‌اند که حالت‌های مقید در لایه‌ی $GaAs$ که توسط لایه‌ی $Ga_{1-x}Al_xAs$ ($0 < x < 0.35$) محبوس شده‌اند را می‌توان به صورت جمله‌ی پتانسیل موثر تشبیه کرد که از لحاظ میکروسکوپی یکنواخت^۳ هستند [۷-۵]؛ محبوس شدن الکترون در این ساختارهای بسیار بسیار کوچک که ابعادی در مقیاس نانو دارند خود بر چند قسم است: اگر محبوس شدگی فضایی، در یک بعد باشد با ساختار چاه کوانتومی روبه‌رو هستیم؛ اگر محبوس شدگی فضایی در دو بعد باشد آن را سیم کوانتومی^۴ می‌نامیم و اگر در سه بعد باشد آن را نقطه‌ی کوانتومی^۵ می‌نامیم.

وارد کردن یک ناخالصی دهنده‌ی هیدروژن گونه در چندساختاری‌ها، خواص آن را به طور موثر تغییر می‌دهد و بحث مهمی تحت عنوان انرژی بستگی را پیش روی ما می‌گشاید. انرژی بستگی همان انرژی ای است که الکترون موجود در ساختار را به ناخالصی دهنده که درون ساختار محبوس شده، مقید می‌کند [۲۱-۸]. شناختن تاثیرات اپتیکی و الکترونیکی ناخالصی‌ها در چنین سیستم‌هایی مهم است زیرا خواص ابزارهایی که از این مواد ساخته می‌شوند به شدت تحت تاثیر حضور ناخالصی‌هاست.

هم‌چنین مفهوم جرم موثر در این ساختارهای کوانتومی، مفهومی اساسی و تامل برانگیز است که معمولاً در مطالعه‌ی این خواص، به ویژه در توصیف فیزیک بلورهای ترکیبی^۶ [۲۳ و ۲۲] و نانوقطعات نیمه‌رسانا [۲۶-۲۴] به آن توجه می‌شود. سیستم‌های کوانتومی‌ای که در آنها جرم وابسته به مکان باشد، در مطالعه‌ی مسایل چندجسمی از قبیل خواص الکترونیکی نیمه‌رساناها [۲۲] و نقاط کوانتومی [۴۵-۲۷] مفیدند.

¹ Low dimensional

² Bulk

³ Smooth

⁴ Quantum wire

⁵ Quantum dot

⁶ Compositionally graded

علاوه بر مطالعه‌ی جرم موثر وابسته به مکان^۱، می‌توان از میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی به عنوان ابزارهایی برای بررسی خواص ناخالصی در چندساختاری‌ها سود جست. به طوری که اثر توأمان یک میدان مغناطیسی و یک میدان الکتریکی بر حالت‌های انرژی ناخالصی نیز جالب توجه است. در همین راستا Cen و Bajaj با استفاده از روش وردشی^۲ چاه‌های کوانتومی را در حالت‌های متقارن و نامتقارن تحت اعمال میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی بررسی کرده‌اند [۴۶ و ۴۷].

Wang و Chuu سطح انرژی الکترون آزاد را در چاه‌های کوانتومی یگانه و دوگانه در حضور میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی محاسبه کردند [۴۸ و ۴۹] Mono zon و همکارانش نیز نشان دادند که یک تقریب تحلیلی را می‌توان برای در نظر گرفتن یک الکترون اتم ناخالصی در چاه کوانتومی نامتناهی و در حضور میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی به کار برد [۵۰].

علاوه بر همه‌ی این‌ها، مشاهده شد که آنچه به حقیقت فیزیکی نزدیک‌تر است، چاه‌های پتانسیل فیزیکی V-شکل هستند (VQW) (منبع)^۳ یعنی پروفایل‌های واقعی پتانسیل به شکل V نزدیک‌ترند تا به شکل مربع؛ و بدین ترتیب چاه‌های کوانتومی V-شکل مورد توجه قرار گرفتند.

این چاه‌ها خواص منحصر به فردی دارند که نمی‌توان در چاه‌های کوانتومی مربعی به دست آورد. خواصی از قبیل حساسیت جذب زیرنوری برای نور فرودی معمولی [۵۱]. همچنین چاه‌های کوانتومی V-شکل کاربردهایی در ساخت لیزرهای نوین دیود نیمه‌رسانا [۵۲] و قطعات اپتوالکترونیک مادون قرمز دارند [۵۳].

در تمام این چندساختاری‌ها و مدل‌های کوانتومی، همواره باید هامیلتونی سیستم نوشته شده و معادله‌ی شرودینگر حاصل از آن حل شود که مسلماً حل تحلیلی آن در اکثر موارد موجود نمی‌باشد و باید از روش‌های تقریبی یا عددی حل شود. لازم به توضیح است که حل معادله‌ی شرودینگر در حضور جرم موثر وابسته به مکان نیاز به تصحیح مناسبی دارد. زیرا همان‌طور که می‌دانیم در قطعات نیمه‌رسانا، یک چاه کوانتومی از چندین لایه‌ی نازک تشکیل می‌شود و جرم موثر الکترون در یک لایه‌ی نازک، متناسب با آهنگ برهم‌نهی لایه‌ها تغییر می‌کند که تابعی از مکان است بنابراین جرم موثر الکترون نیز تابعی از مکان خواهد بود. در نتیجه هامیلتونی را باید در یک فرم تصحیح شده نوشت و سپس به حل معادله‌ی شرودینگر پرداخت.

¹ PDEM

² Variational method

³ V-shaped quantum well

در پایان نامه‌ی حاضر، ترتیب نوشتار مطالب از این قرار است:

در فصل دوم مفاهیم پایه به طور خلاصه ارایه می‌شود و چشم اندازی از مباحث بنیانی مرتبط با موضوع، بیان می‌شود. در فصل سوم روش‌های حل معادله‌ی شرودینگر و به دست آوردن انرژی از طریق روش شوتینگ مطرح می‌شود و در پایان فصل، مفهوم انرژی بستگی را معرفی کرده و آنگاه تغییرات انرژی بستگی را بر حسب پهنای چاه و سایر عوامل برای برخی از چاه‌های کوانتومی مطالعه می‌کنیم. در فصل چهارم تاثیر عوامل مختلف بر انرژی بستگی را مشخصاً مورد بررسی قرار داده و نمودارهای انرژی بستگی و توابع موج مربوطه را در انواع چاه‌های کوانتومی و در حضور میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی به دست می‌آوریم و سپس به مطالعه‌ی این مدل‌های کوانتومی در حضور جرم موثر وابسته به مکان است می‌پردازیم که هدف اصلی این پایان نامه است.

در فصل پنجم نیز نتایج حاصل از این پایان نامه و پیشنهاداتی را برای ادامه‌ی کار مطرح می‌کنیم. فهرست مراجع، چند پیوست و نمونه‌ای از محاسبات عددی نیز در پایان کار ارائه می‌شوند.

فصل دوم

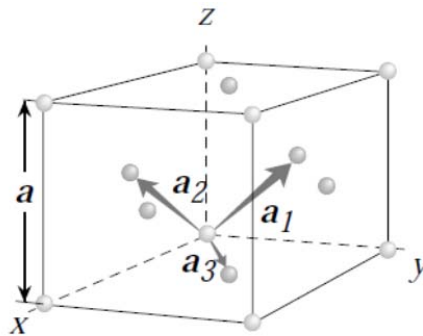
مفاهیم پایه
مفاهیم پایه

۱-۲ بلور چیست؟

بلور ایده آل از آرایش اتمها بر روی یک شبکه تشکیل می شود. شبکه به وسیله ی سه بردار انتقال اساسی \mathbf{a}_1 ، \mathbf{a}_2 و \mathbf{a}_3 به گونه ای تعریف می شود که آرایش اتمها از دید هر ناظر در نقطه ی \mathbf{r}' و از دید هر ناظر در نقطه ی \mathbf{r} یکسان به نظر آید

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}' + u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + w\mathbf{a}_3 ,$$

که u ، v و w اعداد صحیح هستند. شبکه ی براوه^۲ یک عبارت متداول برای هر شبکه ی متمایز است که پایه های اتمی در هر نقطه از آن می نشینند.



شکل (۱-۲) نمایشی از شبکه ی براوه ی مرکز سطحی

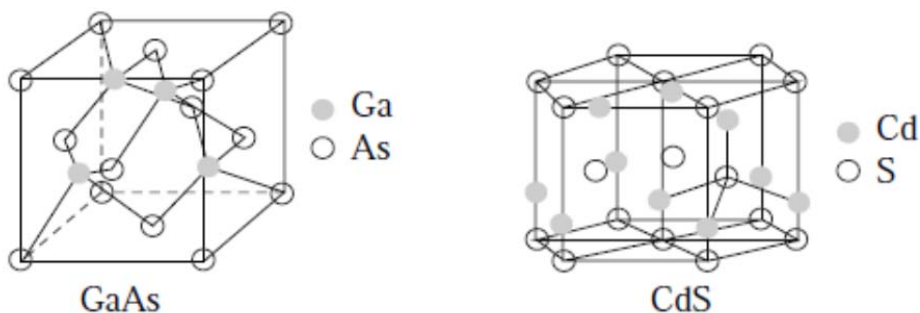
موادی از قبیل Si، Ge، GaAs، AlAs، InP و ... پایه ی دو اتمی دارند. برای عناصر گروه IV از قبیل Si و Ge به خاطر یکسان بودن اتمها در پایه ها، ساختار بلوری شبیه الماس است. برای نیمه رساناهای (که در ادامه به معرفی آنها خواهیم پرداخت) ترکیبی II-VI و III-V از قبیل GaAs، AlAs، InP، HgTe و CdTe آنیون ها در $(-1/8, -1/8, -1/8)$ می نشینند و کاتیون ها در $(1/8, 1/8, 1/8)$ می نشینند که این نوع چیدمان، ساختار زینک بلاند^۳ نامیده می شود. تنها استثنا در این زمینه GaN

¹ -Crystal

² -Bravia

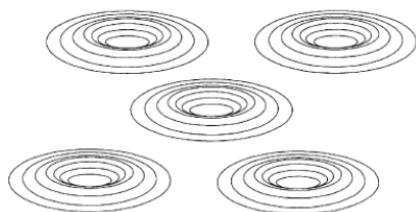
³ - zinc blende

و آلیاژهای مهم آن یعنی $In_xGa_{1-x}N$ است که این مواد ساختار ورتسایت^۱ دارند و در سالهای اخیر به خاطر استفاده از آن ها در لیزرها و دیودهای نور آبی و سبز بسیار مورد توجه بوده اند.



شکل (۲-۲) ساختارهای بلوری وورتزیت (راست) و زینک بلاند (چپ).

از نقطه نظر الکتروستاتیکی، پتانسیل بلوری شامل یک شبکه سه بعدی از پتانسیل های متقارن کروی هسته ی یونی می باشد که توسط الکترونها ی پوسته ی داخلی پوشانده می شوند و بیشتر با توزیع بارهای پیوند کووالانسی^۲ که آنها را کنار هم نگه می دارد احاطه شده اند.



شکل (۳-۲) توضیح شماتیک مولفه ی هسته ی یونی پتانسیل بلوری در صفحات $\{001\}$ - یک آرایه ی ۳ بعدی از پتانسیل های

متقارن کروی [۵۴].

^۱ - wurtzite

^۲ - covalant bond