٣٥١٨٣

بسم الله الرحمن الرحیم

محاسبه ترازهای انرژی ساختارهای کوانتمی محدود

بوسیله

ابراهیم صادقی

۱۳۸۰ /۶/ ۲۵

پایان نامه

ارائه شده به دانشکده تحصیلات تکمیلی به عنوان بخشی از فعالیتهای لازم
برای اخذ درجه دکتری

در رشته

فیزیک

از

دانشگاه شیراز

شیراز-ایران

013211

ارزیابی و تصویب شده توسط کمیته پایان نامه با درجه: عالی

امضاء اعضاء کمیته پایان نامه

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

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

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

دکتر محمود مرادی ، دانشیار بخش فیزیک .....

مرداد ماه ۱۳۸۰

۳۶۱۸۳

سپاسگزاری

به‌نام و با سپاس از درگاه ایزد یکتا

بدینوسیله از تمام افرادی که مرا در انجام این رساله یاری نموده‌اند ، بویژه از بذل‌توجه و راهنمایی‌های استاد گرامی جناب آقای دکتر محمود براتی خواجویی که راهگشای اینجانب در نیل به این هدف بوده‌اند قدردانی می‌نمایم. از اعضای محترم کمیته پایان‌نامه آقایان دکتر هادی سلامتی ، دکتر محمد مهدی گلشن و دکتر محمود مرادی که در تدوین این رساله مرا راهنمایی کردند ، تشکر می‌نمایم.

همچنین از خانواده عزیزم که با صبر و بردباری مشوق من بودند تقدیر می‌نمایم.

چکیده

محاسبه ترازهای انرژی ساختارهای محدود کوانتمی

توسط :

ابراهیم صادقی

در این رساله در ابتدا با استفاده از نظریه جرم مؤثر، ویژه مقادیر انرژی الکترون‌ها و حفره‌ها در سیم‌های کوانتمی با سطح مقطع مستطیلی و مکعبی شکل محاسبه می‌گردد. در این تقریب ضمن ارائه شکل خاصی برای وابستگی مکانی جرم مؤثر حامل‌ها، ارتفاع سد پتانسیل نیز محدود در نظر گرفته می‌شود. با استفاده از داده‌های موجود برای سیستم‌های $GaAs/Ga_{0.63}Al_{0.37}As$ و $Ga_{0.47}In_{0.53}As/InP$ ویژه مقادیر انرژی برای این دو سیستم محاسبه و نتایج بدست آمده با نتایج تجربی و نتایج محاسبه شده توسط دیگران مقایسه می‌گردد. نتایج بدست آمده در توافق بهتری (نسبت به نتایج دیگران) با نتایج تجربی می‌باشد.

از طرف دیگر کوچک شدن ابعاد جسم بر روی خواص ترابری سیستم‌ها نیز تأثیر می‌گذارد. در همین راستا وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی سیم‌های استوانه‌ای باریک مورد بررسی قرار می‌گیرد. بدین منظور نظریه پراکندگی مرزی Fuchs-sondheimer که برای لایه‌های نازک فلزی با سطح فرمی کروی ارائه گردیده است برای سیم‌های نازک فلزی با سطح مقطع دایره‌ای و سطح فرمی بیضوی تعمیم داده و رسانندگی الکتریکی این گونه سیم‌ها محاسبه می‌گردد. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که رسانندگی در این سیستم‌ها به فرآیند پراکندگی حاملها از سطح و به ضخامت سیم ، برای سیم‌هایی با قطری کوچکتر از پویش آزاد میانگین حامل‌ها، بستگی دارد. نسبت مقاومت سیم‌های باریک بیسموت به مقاومت کپه‌ای آن برای ضخامت‌های مختلف محاسبه گردیده و وابستگی دمایی مقاومت ویژه سیم‌های نازک بیسموت نیز محاسبه و با نتایج تجربی

گزارش شده توسط Gurvitch مقایسه می‌گردد. توافق نسبتاً خوبی که بین نتایج تجربی و نظری وجود دارد نشانگر این است که برای نمونه‌های باریک بیسموت با ابعادی بزرگتر از ۱۰۰ nm مکانیزم پراکندگی حاکم بر سیستم ، پراکندگی حاملها توسط سطوح مرزی بوده و آثار ناشی از کوانتیده شدن ترازهای انرژی در اندازه‌گیریهای انجام شده بی‌تأثیر می‌باشد.

فهرست مندرجات

عنوان	صفحه
فهرست جداول	هفت
فهرست اشکال	هشت
فصل ۱: مقدمه	۱
فصل ۲: تقریب جرم مؤثر	۸
۲–۱ تقریب تابع پوشا	۹
۲–۲ ساختارهای کوانتمی محدود	۱۲
۲–۳ حالتهای الکترونی سیم کوانتمی با سد پتانسیل بینهایت	۱۴
۲–۴ شرایط مرزی در تقریب جرم مؤثر	۱۶
۲–۵ اعمال تقریب جرم مؤثر به سیم کوانتمی	۱۹
۲–۶ اعمال تقریب جرم مؤثر به چاه کوانتمی ۳ بعدی	۲۲
۲–۷ ساختار بلور	۲۳
۲–۷–۱ ساختار نیمرسانا	۲۵
۲–۷–۲ بستگی گاف نواری به فشار و دما	۲۶
۲–۷–۳ جرم مؤثر	۲۷
فصل ۳: رسانندگی سیم‌های باریک	۳۰
۳–۱ ساختار بلوری بیسموت	۳۲
۳–۲ معادله بولتزمن	۳۴
۳–۳ تأثیر اندازه بر روی مقاومت سیمهای باریک	۳۸

۳–۴ رسانندگی گرمایی ۴۲
۳–۵ رسانندگی الکتریکی ۴۷
۳–٦ اثر کوانتمی پیکر در سیمهای باریک ۴۹
فصل ۴: محاسبه ترازهای انرژی و مقاومت ویژه سیم‌های باریک ۵۸
۴–۱ انرژی حالت پایه حاملها در سیم کوانتمی ۵۸
۴–۲ محاسبه ترازهای انرژی مکعب کوانتمی ٦٦
۴–۳ محاسبه مقاومت ویژه سیم‌های باریک بیسموت ۷۱
فصل ۵: نتایج ۸۰
فهرست مراجع
چکیده و عنوان به زبان انگلیسی

فهرست جداول

جدول — صفحه

جدول ۴—۱: جرم مؤثر و ارتفاع سد پتانسیل الکترون. ۶۴

جدول ۴—۲: جرم مؤثر و ارتفاع سد پتانسیل حفره‌ها. ۶۶

جدول ۴—۳: ویژه مقادیر انرژی الکترونها با در نظر گرفتن اثرات مرز و بدون اثرات مرز در سیم کوانتمی. ۶۷

جدول ۴—۴: ویژه مقادیر انرژی حفره‌ها با اثرات مرز و بدون اثرات مرز در سیم کوانتمی. ۶۸

جدول ۴—۵: ویژه مقادیر انرژی حاملها با سد پتانسیل بینهایت ۶۹

جدول ۴—۶: ترازهای انرژی الکترون با در نظر گرفتن اثرات مرز و بدون اثرات مرز در مکعب کوانتمی. ۷۱

جدول ۴—۷: ترازهای انرژی حفره‌ها با در نظر گرفتن اثرات مرز و بدون اثرات مرز در مکعب کوانتمی. ۷۲

جدول ۴—۸: ویژه مقادیر انرژی حاملها در مکعب کوانتمی با سد پتانسیل‌بینهایت. ۷۳

فهرست اشکال

شکل | صفحه

شکل ۲–۱: طرح یک چاه کوانتمی و تغییر انرژی گاف نوار. ۱۳

شکل ۲–۲: طرح مواد کپه‌ای ، چاه کوانتمی ، سیم کوانتمی و نقطه کوانتمی . ۱۴

شکل ۲–۳: طرح یاخته اولیه گالیم آرسنایدِ. ۲۴

شکل ۲–۴: نمودار نوار انرژی بلور GaAs بر حسب تکانه ۲۶

شکل ۲–۵: نمودار نوار انرژی si بر حسب تکانه بلور. ۲۷

شکل ۲–۶: تغییرات گاف نواری GaAs بر حسب دما. ۲۸

شکل ۳–۱: نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای ابعاد مختلف ۳۱

شکل ۳–۲: طرح یاخته اولیه بیسموت ۳۳

شکل ۳–۳: رسانندگی گرمایی نمونه‌های مختلف بیسموت بر حسب دما ۴۵

شکل ۳–۴: مقاومت ویژه نمونه‌های مختلف بیسموت بر حسب دما ۵۰

شکل ۳–۵: نمایش توزیع ترازهای انرژی برای a: غشاء و b: سیم نازک. ۵۲

شکل ۴–۱: نمایش تابع موج الکترون در سیم کوانتمی بازاء $l = m = ۲$. ۶۰

شکل ۴–۲: نمایش تابع موج الکترون در سیم کوانتمی بازاء $l = m = ۸$. ۶۱

شکل ۴–۳: نمایش تابع موج الکترون در سیم کوانتمی بازاء $l = m = ۱۰$. ۶۲

شکل ۴–۴: انرژی حالت پایه الکترون با در نظر گرفتن تأثیر جرم و بدون آن بر حسب ابعاد سیم . ۶۳

شکل ۴–۵: جابجایی انرژی الکترون در سیم کوانتمی بر حسب ابعاد سیم . ۶۵

شکل ۴–۶: جابجایی انرژی در مکعب کوانتمی . ۷۰

شکل ۴–۷: نسبت رسانندگی سیم‌های باریک به رسانندگی توده‌ای بیسموت. ۷۶
شکل ۴–۸: وابستگی دمایی مقاومت ویژه سیم‌های باریک بیسموت بازاء μ_0های مختلف. ۷۸
شکل ۴–۹: مقایسه وابستگی دمایی مقاومت ویژه سیم‌های باریک بیسموت بازاء μ_0های مختلف با نتایج مناسب. ۷۹

فصل ۱
مقدمه

در اوایل سال ۱۹۵۰ با اختراع ترانزیستور ، تحول عظیمی در رشته الکترونیک و نیز در توسعه سیستم‌های الکترونیکی پدید آمد ، و خواص الکترونیکی نیمرساناها مبحث بسیار جذاب پژوهش و مهندسی گردید. نتایج این تحقیقات به تکاملی در الکترونیک با کاربردهای متعدد دستگاههای الکترونیکی تمام جامد منجر شد که هم اکنون جانشینی بر تکنولوژی قدیم مبتنی بر لامپ‌های خلاء [۱] گردیده است . مطالعه خواص نوری نیمرساناها از جمله موضوعات مورد توجهی است که قادر است در ارتباط تنگاتنگ خود با الکترونیک تحولات چشمگیرتری را تحقق بخشد. لیزرهای نیمرسانا مثال ارزنده‌ای است که نشان می‌دهد چقدر خواص اپتیکی و الکترونیکی نیمرساناها به یکدیگر وابسته هستند.

در سالهای اخیر علاقه زیادی به ساختارهای کوانتمی که در آنها حاملها بدلیل محدودیت هندسی جسم محبوس می‌باشند نشان داده شده است ، و پیش‌بینی می‌شود که ترانزیستورها و لیزرهای ساخته شده با چنین ساختارهایی دارای مشخصه‌های اجرایی بهتری باشند.

تکنیکهای امروزی رشد ، نظیر برآرایی باریکهٔ مولکولی [۲] (MBE) و نشست بخار شیمیایی فلز آلی [۳] (MOCVD) ، این امکان را فراهم می‌سازد که بتوان ساختارهای نیمرسانای فرانازک [۴] با کیفیت بالا تهیه کرد[۱ ،۲]. در چنین ساختارهایی الکترون‌ها از

---

[۱] Vacuum Tubes

[۲] Molecular Beam Epitaxy

[۳] Metal Organic Chemical Vapor Deposition

[۴] Submicron

لایهٔ Donor به لایهٔ Active منتقل شده و در آنجا بشکل یک گاز الکترونی[۵] محبوس می‌گردند. خواص الکترونیکی و اپتیکی این چنین گاز الکترونی تحت تأثیر محدودیت کوانتمی قرار گرفته و رفتارهای متفاوتی را نشان می‌دهند.

ساختارهای نیمرسانای با ابعاد کوچک همانند: چاههای کوانتمی ، سیم‌های کوانتمی و نقاط کوانتمی نمونه‌هایی از سیستم‌ها فوق می‌باشند. برای مثال در سیم‌های کوانتمی الکترونهای محبوس شده رفتاری شبه یک–بعدی [۶] ازخود نشان می‌دهند ، بعبارت دیگر در این سیستم‌ها حرکت الکترونها و حفره‌ها در دو راستا محدود بوده و فقط در راستای محور سیم آزادانه حرکت می‌کنند. ویژگیهای اپتیکی چنین ساختارهایی نخستین بار حدود دو دهه قبل توسط دینگل[۷] [۲] گزارش شده و همزمان با آن مطالعات نظری بر روی این سیستم‌ها نیز آغاز شده است [۳]. نظربااینکه از سیم‌های کوانتمی در ساخت ابزارهای دقیق نوری و الکترونیکی استفاده می‌شود لازم است محاسبات دقیقی برروی خواص کوانتمی آنها صورت گیرد. برای محاسبه ویژه مقادیر انرژی ساختارهای محدود–کوانتمی [۸] می‌بایست معادله شرودینگر را با توجه به شرایط مرزی مناسب حل کرد. چنانچه در این سیستم‌ها ارتفاع سدپتانسیل نامحدود فرض شود محاسبات باسانی انجام شده و ترازهای انرژی مشخص می‌گردند[۴] . لیکن در این ساختارها ارتفاع سد پتانسیل محدود بوده و در نتیجه ویژه‌مقادیر انرژی نسبت به حالت قبل کاملاً متفاوت خواهد بود. در این وضعیت بجز موارد چاه کوانتمی با تقارن کروی و سیم‌کوانتمی با سطح مقطع دایره‌ای ، معادله شرودینگر جواب تحلیلی نداشته و می‌بایست بصورت عددی[۹] حل گردد[۵]. جواب معادله شرودینگر با سدپتانسیل محدود برای چاه کوانتمی کروی بصورت توابع بسل و برای سیم کوانتمی با سطح مقطع دایره‌ای بشکل توابع ماتیو

---

[۵] Electron Gas

[۶] Quasi-one dimentional

[۷] Dingle

[۸] Quantum -confinement-structures

[۹] Numerical

[10] می‌باشد[٦]. از طرف دیگر اینگونه ساختارهای نیمرسانا از دو ناحیه چاه [11] و سد[12] تشکیل شده‌اند و از آنجائیکه مواد تشکیل دهنده این نواحی یکسان نیستند جرم مؤثر حاملها (الکترونها و حفره‌ها) نیز در این مناطق متفاوت می‌باشد ، بنابراین انتظار می‌رود که این تغییر جرم در انرژی حاملها تأثیر بگذارد. بدلیل تفاوت جرم حاملها در نواحی مختلف ، برای محاسبه ویژه مقادیر انرژی ، می‌توان از معادله شرودینگر در تقریب جرم مؤثر[13] استفاده کرد. در این تقریب پیچیدگی‌های ناشی از پتانسیل دوره‌ای بلورها در تانسور جرم مؤثر بیان می‌گردد ، بنابراین تقریب جرم مؤثر روشی ساده بوده و در تعیین حالات الکترونی و دیگر خواص نیمرساناها دارای کاربرد وسیعی می‌باشد.

این نظریه در ابتدا برای بررسی ناخالصی‌های موجود در بلور بیان گردید و سپس برای بلورهای نیمرسانا توسعه یافت. در حالت نخست تابع موج تک الکترونی [14] برای ناخالصی نزدیک به لبهٔ نوار رسانش ، از معادله شرودینگری با هامیلتونی بصورت :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + E^c + u(r) \qquad (1-1)$$

پیروی می‌کند ، که در آن E^c می‌نیمم تابع پاشندگی انرژی و $u(r)$ اختلال بلور دوره‌ای می‌باشد. در صورتیکه برای نیمرساناها تابع موج الکترونی از معادله دیفرانسیلی زیر تبعیت می‌کند[٦]:

$$\frac{\hbar^2}{2}\nabla\cdot(\frac{1}{m_i^*})\nabla F_i + (E - E_i)F_i = 0 \qquad (2-1)$$

در این رابطه F_i ، E_i ، E و m^* بترتیب تابع موج ، ارتفاع سدپتانسیل ، ویژه مقدار انرژی و جرم مؤثر حاملها می‌باشند. معادله فوق فقط در حالتهای خاصی جواب تحلیلی دارد ، و در نتیجه بایستی آنرا در اکثر موارد بصورت عددی حل نمود. برای این منظور نخست

---

[10] Mathiu Function

[11] Well

[12] Barrier

[13] Effective Mass Approximation

[14] Envelope Function

تابع موج مناسبی که در شرایط مرزی مسأله صدق کند بعنوان پایه انتخاب می‌شود . در این تقریب معمولاً از توابع دوره‌ای متعامد (OPF)[۱۵] استفاده می‌گردد. آنگاه نحوهٔ تغییرات جرم را در مناطق چاه و سد تعیین کرده و گرادیان آنرا محاسبه نموده ، و نهایتاً با استفاده از رابطه (۱—۲) ویژه مقادیر انرژی را در وضعیتهای مختلف محاسبه می‌گردد.

از طرف دیگر ، محدودیت هندسی جسم سبب تغییر در پارامترهای ماکروسکوپی آن می‌شود . برای مثال ، تغییر در رسانندگی الکتریکی و گرمایی سیم‌های باریک[۱۶] نتیجه‌ای از محدودیت پیکر در این سیستم‌ها می‌باشد[۳ ،۷]. دو نوع اثر پیکر در نمونه‌های فلزی باریک دیده شده است ، اثر پیکر معمولی[۱۷] و اثر پیکر کوانتمی[۱۸].

هنگامیکه پویش آزاد میانگین (mfp)[۱۹] حاملها با ابعاد نمونه قابل مقایسه شود اثرپیکر معمولی مشاهده می‌گردد. دراین وضعیت ، بدلیل اینکه پراکندگی حاملها از سطح نمونه فزونی می‌یابد ، مقاومت ویژه نمونه[۲۰] از مقاومت ویژه حالت کپه‌ای[۲۱] بزرگتر می‌گردد.

از جهت دیگر وقتیکه ضخامت نمونه از مرتبه طول موج الکترون‌ها گردد ، الکترونها محبوس شده و اثر پیکر کوانتمی مشاهده می‌شود . تحت این شرایط ، کوانتیدگی ترازهای انرژی الکترونها محسوستر گشته و چگالی حالتها اصلاح می‌گردند. متعاقب آن زمان واهلش[۲۲] و تحرک[۲۳] حاملها نیز تحت تأثیر قرار خواهند گرفت. بنابراین تحت این شرایط تمام کمیتهایی که به تحرک وابسته‌اند بصورت تابعی از ضخامت نمونه نوسان

---

[۱۵] Orthogonal Periodic Function

[۱۶] Nanowire

[۱۷] Ordinary Size Effect

[۱۸] Quantum Size Effect

[۱۹] Mean Free Path

[۲۰] Sample

[۲۱] Bulk

[۲۲] Relaxation time

[۲۳] Mobility

خواهند کرد.

اولین بررسی نظری اثر پیکر معمولی توسط فوچز[۲۴] [۸] بر روی لایه‌های نازک[۲۵] فلزی که دارای سطوح فرمی کروی بودند انجام شد ، و پس از آن سوندهیمر[۲۶] [۹] این نظریه را مورد تجدید نظر قرار داد. نظریه Fuchs-Sondheimer شامل دو پارامتر مستقل می‌باشد . k: نسبت ضخامت نمونه به مسیر آزاد میانگین حاملها، و p ، ضریب انعکاس سطح ، که بصورت کسری از حاملها که بطور آینه‌ای[۲۷] از سطح نمونه منعکس می‌گردند تعریف می‌شود. یکی از نتایج این نظریه این است که برای پراکندگی کاملاً آینه‌ای ($p = ۱$) هیچگونه اثر پیکری دیده نمی‌شود ، بعبارت دیگر رسانندگی نمونه‌های باریک و حالت کپه‌ای یکسان می‌باشد ، در صورتیکه برای $p < ۱$ چنانچه ضخامت نمونه کوچکتر از پویش آزاد میانگین حاملها گردد رسانندگی نمونه بسمت صفر میل خواهد نمود.

پریس [۲۸] [۱۰] اثر پیکر را در فلزاتی با سطح فرمی بیضوی بررسی کرد و نتیجه گرفت که برای پراکندگی آینه‌ای ($p = ۱$) ، رسانندگی نمونه‌های خیلی باریک به یک مقدار محدود (غیرصفر) نزدیک می‌گردد . نهایتاً پروت [۲۹] [۱۱] نظریه‌ای را برای فیلمهای نازک با سطح فرمی بیضوی ارائه نمود . او ضریب انعکاس را بصورت تابعی از مؤلفه عمودی سرعت الکترون نسبت به سطح در نظر گرفت و توانست به نتایج جالبی که با نتایج آزمایش در توافق خوبی بودند دست یابد.

از طرف دیگر کارهای تجربی متعددی بر روی رسانندگی سیم‌های باریک انجام گردید که از میان آنها می‌توان به تحقیقات گرویچ [۳۰] [۱۲] در این زمینه اشاره نمود.

---

[۲۴] Fuchs

[۲۵] Thin Films

[۲۶] Sondheimer

[۲۷] specular

[۲۸] Price

[۲۹] Parrott

[۳۰] Gurvitch