Spring & Summer (2023) 5(2): 61-70
DOI: 10.30473/JPHYS.2023.68608.1155
Received: 19 Jul 2023 Accepted: 26 Agu 2023

Optoelectronic

Open Access

ORIGINAL ARTICLE

Electronic Properties of Two Quantum Spheres Confined in the Doped Quantum Wire Using Schrodinger and Poisson-Schrodinger Equation

Mohammad Reza Farahmand[1], Mahmoud Moradi[2*], Abdolrasoul Gharaati[3]

1 Ph.D. Student, Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran.
2 Professor, Department of Physics, Shiraz University, Shiraz, Iran.
3 Professor, Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran.

Correspondence
Mahmoud Moradi
Email: mmoradi@shirazu.ac.ir

ABSTRACT

Quantum structures serve as advanced semiconductors for generating light and, investigating their electronic and optoelectronic properties holds particular significance. Single-photon light sources and associated systems are essential components in the design of quantum photonic systems and, extensive efforts have been made to explore these sources, with semiconductor quantum dots, especially those embedded in semiconductor nanowires, proving highly appealing and, quantum dots with varying energy levels and wave functions that lead to the absorption and emission of diverse photons can find numerous applications. In this study, we first examined the electronic properties of two symmetrically positioned indium arsenide quantum dots within a gallium arsenide quantum wire and, this was achieved through numerical solutions of the Schrödinger equation using the Comsol software and the finite element method and, the obtained results, including energy eigenvalues and eigenfunctions, were compared with theoretical results and findings from related research. The primary focus of this research involved the utilization of the self-consistent Poisson-Schrödinger equation for studying the various nanostructures, by incorporating various impurity values, the influence of impurities on the electronic properties of the quantum nanowire and the structure of the two quantum spheres within the quantum wire was determined. These results were compared with the outcomes of solving the Schrödinger equation under limiting conditions. The results revealed that impurity effects are substantial, whereas temperature effects within the range of low temperatures to ambient temperature are negligible. Furthermore, variations in the internal radii and impurity contamination significantly impact the electronic properties of the nanostructure, and these effects can be quantified.

KEYWORDS

Quantum Structure, Self-Consistent Equation, Doped Impurity, Electronic Properties.

How to cite
Farahmand, M.R., Moradi, M., Gharaati, A. (2023). Electronic Properties of Two Quantum Spheres Confined in the Doped Quantum Wire Using Schrodinger and Poisson-Schrodinger Equation, Optoelectronic, 5(2), 61-70.

© 2023, by the author(s). Published by Payame Noor University, Tehran, Iran.
This is an open access article under the CC BY 4.0 license (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

سال پنجم، شماره دوم، بهار و تابستان 1402 (61-70)

تاریخ دریافت: 1402/04/28 تاریخ پذیرش: 1402/06/04

DOI: 10.30473/JPHYS.2023.68608.1155

دوفصلنامه علمی

اپتوالکترونیک

«مقاله پژوهشی»

مطالعه خصوصیات الکترونی دو کره کوانتومی جایگزیده در سیم کوانتومی آلاییده با استفاده از حل معادلات شرودینگر و پواسون- شرودینگر

محمد رضا فرهمند[1]، محمود مرادی[2*]، عبدالرسول قرائتی[3]

1 دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران.

2 استاد، بخش فیزیک، دانشگاه شیراز، شیراز، ایران

3 استاد، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران.

نویسنده مسئول:

محمود مرادی

رایانامه: mmoradi@shirazu.ac.ir

چکیده

ساختارهای کوانتومی به عنوان منبع پیشرفته نیم‌هادی در تولید نور است و بررسی خصوصیات الکترونی و الکترواپتیکی آنها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. سیستم‌ها و منابع نور تک فوتونی یکی از اجزای اصلی طراحی سیستم‌های فوتونیک کوانتومی هستند و تلاش‌های زیادی برای تحقیق بر روی چنین منابعی صورت گرفته که از بین آنها نقاط کوانتومی نیم‌هادی به طور ویژه جذاب بوده؛ و نقاط کوانتومی تعبیه شده در نانو سیم‌های نیم‌رسانا با سطوح انرژی و توابع موج مختلف، در نتیجه جذب و نشر فوتون‌های متفاوت، می‌توانند کاربردهای متنوعی داشته باشند. بنابراین در این مطالعه، ابتدا خصوصیات الکترونی دو کره کوانتومی متقارن از جنس ایندیوم آرسناید درون استوانه کوانتومی گالیوم آرسناید، با حل عددی معادله شرودینگر و با استفاده از نرم‌افزار کامسول بررسی و نتایج به دست آمده شامل ویژه توابع و ویژه مقادیر انرژی، با نتایج به دست آمده از حل نظری و سایر کارهای مشابه مقایسه شده است. در این مرحله تحقیق اصلی، استفاده از معادله خودسازگار پواسون – شرودینگر برای نانو ساختارهای مطالعه‌شده، است که با افزودن مقادیر مختلف ناخالصی، اثر ناخالصی‌ها را بر خصوصیات الکترونی نانو سیم کوانتومی و ساختار دو کره کوانتومی درون سیم کوانتومی به دست آورده و با نتایج حاصل از حل معادله شرودینگر در شرایط حدی مقایسه می‌گردد. نتایج به دست آمده نشان دهنده این است که تاثیر تغییرات شعاع کره‌های داخلی و مقادیر مختلف ناخالصی آلاییده شده، در خصوصیات الکترونی نانو ساختار، قابل توجه و تاثیر دما از دماهای پایین تا دمای محیط ناچیز می‌باشد.

واژه‌های کلیدی

ساختار کوانتومی، معادله خودسازگار، آلایش ناخالصی، خصوصیات الکترونی.

استناد به این مقاله:

محمد رضا فرهمند، محمود مرادی، عبدالرسول قرائتی (1402). مطالعه خصوصیات الکترونی دو کره کوانتومی جایگزیده در سیم کوانتومی آلاییده با استفاده از حل معادلات شرودینگر و پواسون– شرودینگر. دوفصلنامه علمی اپتوالکترونیک، 5(2)، 61-70.

مقدمه

پژوهش و مطالعه بر روی خواص فیزیکی ساختارهای کوانتومی نیم‌هادی، نظیر سیم‌ها و نقاط کوانتومی و ترکیبات نانو ساختارها از چند دهه پیش آغاز شده و این سیستم‌ها با روش‌های نظری و تجربی بررسی و مطالعه شده‌اند [1]. با کاهش ابعاد ساختار در محدوده نانومتر و با توجه به شرایط مرزی، حامل‌های موج در ساختارهای کوانتومی محدود شده، سطوح با انرژی‌های مشخص در چاه تشکیل می‌گردد که این سطوح، در اکثر ساختارهای نیم‌هادی با حل معادله شرودینگر در حضور این محدودیت‌ها قابل محاسبه می‌باشد. ساختارهای مختلفی از جمله کره‌های کوانتومی، سیم‌های کوانتومی از جنس‌های گوناگون و کره کوانتومی درون سیم کوانتومی از این روش بررسی شده است [2-10].

همچنین گستره وسیعی از کاربردهای فناورانه ساختارهای کوانتومی اعم از ساختارهای تکی و چندتایی به طور گسترده در شرایط فیزیکی مختلف مانند فرایند آلایش‌های مختلف و عواملی شبیه این بررسی و مطالعه شده است. استفاده از معادله پواسون – شرودینگر در مقایسه با سایر روش‌ها تقریب دقیق‌تری از چگالی حالت‌ها و ترازهای انرژی نسبت به حالت واقعی ارائه می‌دهد که تاثیر حامل‌های آلاییده شده و حامل‌های آزاد را در نظر گرفته و حل معادلات از این روش به خوبی بیانگر تغییرات در حضور ناخالصی‌ها است [11-18] مطالعه خصوصیات الکترونی سیم‌های کوانتومی از جنس گالیوم آرسناید با سطح مقطع‌های مختلف توسط جیل و همکاران انجام گردید [14]. سیستم‌ها و منابع نور تک فوتونی یکی از اجزای اصلی طراحی سیستم‌های فوتونیک کوانتومی هستند و تلاش‌های زیادی برای تحقیق بر روی چنین منابعی صورت گرفته که از بین آنها نقاط کوانتومی نیم‌هادی به طور ویژه جذاب بوده و نقاط کوانتومی تعبیه شده در نانو سیم‌های نیم‌رسانا، بازدهی و استفاده فراوان در ساخت چنین سیستم‌هایی دارند؛ بنابراین در این مطالعه ابتدا خصوصیات الکترونی نانو ساختار دو کره کوانتومی که به صورت متقارن نسبت به مرکز استوانه سیم کوانتومی قرار گرفته است را با حل معادله شرودینگر و باروش المان محدود و استفاده از نرم‌افزار کامسول محاسبه کرده و اثر تغییرات شعاع را به دست آورده، سپس با استفاده از معادله پواسون – شرودینگر و با آلایش مقادیر مختلف ناخالصی در نانوسیم کوانتومی و ساختار دو کره کوانتومی درون سیم کوانتومی، نتایج بررسی می‌شود.

نظریه

اگر از اثرات مستقیم پتانسیل الکتریکی به وجود آمده ناشی از الکترون‌های موجود در ساختار بر روی یکدیگر صرفه‌نظر کرد، با حل معادله شرودینگر می‌توان ترازهای انرژی و خصوصیات الکترونی و اپتیکی ساختار را استخراج کرد، ولی در حالت کلی در ساختارهای نامتجانس، یک الکترون به دلیل حضور سایر الکترون‌ها و همچنین ناخالصی‌های یونیزه موجود در شبکه، پتانسیل الکتروستاتیکی را تجربه می‌کند که این پتانسیل با اثر گذاشتن روی ساختار نواری نامتجانس، موجب تغییراتی در ترازهای انرژی ساختار می‌گردد و نحوه توزیع حامل‌ها و موقعیت تراز فرمی را دستخوش تغییرات می‌کند. از آنجایی که حامل‌های بار در ناخالصی اضافه شده تمایل به کسب کمترین انرژی کل را دارند؛ بنابراین حالت‌هایی با حداقل انرژی را اشغال خواهند کرد و این تغییر الکترون‌ها منجر به ایجاد بار الکتریکی در چاه پتانسیل کوانتومی به وجود آمده منتج از تغییر ماده‌های تشکیل دهنده نانو ساختار و تغییر در مرزها و بار مخالف در محل اتم‌های اهدا کننده یا گیرنده می‌گردد. این توزیع مجدد بار، باعث به وجود آمدن پتانسیل الکتریکی جدید می‌گردد که خود باعث ایجاد تغییرات در نوار رسانش و ظرفیت می‌شود. یافتن پاسخی مناسب برای پتانسیل الکتروستاتیکی ساختار و ترازهای انرژی در حضور سایر الکترون‌ها و ناخاصی‌های افزوده شده، با استفاده از محاسبات عددی روندی پیچیده دارد و یکی از روش‌های متداول برای حل معادلات حاکم بر این ساختارها حل معادله خودسازگار پواسون – شرودینگر است.

برای دستیابی به ویژه مقادیر انرژی و توابع موج ساختار مطالعه شده، معادله شرودینگر تک ذره‌ای با تقریب جرم موثر را حل می‌کنیم. معادله مستقل از زمان شرودینگر در دستگاه مختصات استوانه‌ای به صورت رابطه (1) بیان می‌شود

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)+U\Psi=E\Psi \quad (1)$$

در رابطه فوق $\hbar=\frac{h}{2\pi}$ ثابت پلانگ کاهش یافته، Ψ تابع موج، U انرژی پتانسیلی که ذره تحت تاثیر آن قرار دارد، m^* جرم موثر حامل که مقدار آن برای ساختارهای گوناگون، متفاوت است و E ویژه مقادیر انرژی، که در معادله (1) $\Psi(\rho,\varphi,z)=P(\rho)\Phi(\varphi)Z(z)$ است. در صورتی که ساختار در نظر گرفته شده دارای تقارن استوانه‌ای باشد، توابع موج را به صورت رابطه (2) در نظر گرفته می‌شود

$$\Psi(r,\varphi,z)=\Psi_c(r,z)e^{im\varphi} \quad (2)$$

که در آن m اندازه حرکت زاویه‌ای و به دلیل تقارن استوانه‌ای ساختار، عدد صحیح و کوانتومی است. با جایگذاری تابع موج در معادله شرودینگر رابطه (3) به دست می‌آید

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2\psi_c(r,z)}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial\psi_c(r,z)}{\partial r}+\frac{\partial^2\psi_c(r,z)}{\partial z^2}-\frac{m^2}{r^2}\psi_c(r,z)\right)+U\psi_c(r,z)=E\psi_c(r,z) \quad (3)$$

با استفاده از رابطه (3) می‌توان معادله شرودینگر را برای ساختارهای با تقارن استوانه‌ای بررسی و خواص مرتبط را محاسبه نمود.

روش بررسی سیستم با حل معادلات خودسازگار شرودینگر و پواسون برای محاسبه سطوح انرژی یک ساختار نامتجانس محدود شده از اهمیت فوق‌العاده‌ای برخوردار است، از آن جهت که این روش در مقایسه با سایر روش‌ها، امکان توصیف دقیق‌تری از چگالی حجمی حامل‌های بار توزیع شده که در دستگاه‌های واقعی وجود دارد را ارائه می‌دهد. یک الکترون به دلیل قرار گرفتن در ساختار شبکه و نزدیکی با سایر الکترون‌ها و ناخالصی‌های شبکه، تحت تاثیر پتانسیل الکتروستاتیکی قرار می‌گیرد که این پتانسیل با اثر گذاشتن روی ساختار نواری باعث به وجود آمدن تغییر در ترازهای انرژی ساختار، نحوه توزیع حامل‌ها و تغییرات در تراز فرمی می‌شود. همان طور که می‌دانیم حامل‌های بار ناشی از آلایش تمایل به کسب حداقل انرژی کل را دارند در نتیجه حالت‌های قابل دسترس چاه کوانتومی را اشغال می‌کنند و باعث جدایی حامل‌های بار از اتم‌های مربوطه می‌گردند و باعث به وجود آمدن بار الکتریکی در چاه کوانتومی و بارهای متضاد در منطقه اتم‌های آلاییده می‌شود. این توزیع مجدد بار در ساختار نامتجانس منجر به ایجاد پتانسیل الکتریکی جدید خواهد شد که خود دلیل ایجاد تغییر در نوار رسانش و نوار ظرفیت می‌شود. جریان حامل‌ها زمانی پایان می‌یابد که تمامی حالات قابل دسترس چاه کوانتومی اشغال شود و پتانسیل دافعه کولنی ناشی از حامل‌های بار موجود در چاه مانع از ورود حامل‌های جدید به چاه شود. حل خودسازگار شامل حل معادله پواسون برای دستیابی به پتانسیل الکتریکی به دلیل توزیع حامل‌های بار و اتم‌های آلاییده است. بیشترین تاثیر حامل‌های افزوده شده و حامل‌های آزاد در لبه نوار است و توزیع مجدد بار باعث تغییر شکل لبه نوار می‌گردد که بررسی سیستم با حل معادلات پواسون - شرودینگر به خوبی بیانگر این تغییرات است و اثر حامل‌ها به نحو مطلوبی در نظر گرفته می‌شود. باز توزیع بار در داخل نانو ساختارها یا ساختارهای نامتجانس باعث به وجود آمدن پتانسیل الکتریکی می‌گردد که اثر تبادل و همبستگی ناشی از برهمکنش الکترون – الکترون، در این روش به خوبی در نظر گرفته شده است. چرخه محاسبات پتانسیل الکتریکی با توجه به تغییر توزیع بار و پس از آن محاسبه مجدد توزیع بار از پتانسیل الکتریکی، تا زمانی‌که هر دو محاسبات توزیع بار و پتانسیل الکتریکی با یکدیگر سازگار گردند، تکرار می‌شود. در واقع با تغییرات به وجود آمده در پتانسیل، تغییرات در حالت‌های انرژی و توابع موج بررسی می‌شود. معادله پواسون که بین پتانسیل الکتروستاتیکی ساختار $V(r)$ و تابع توزیع بار $\rho(r)$، ارتباط برقرار می‌کند به صورت رابطه (4) نوشته می‌شود

$$\nabla\cdot\left(\varepsilon\nabla V(\mathbf{r})\right)=-\rho(\mathbf{r}) \quad (4)$$

که ε ثابت گذردهی ماده می‌باشد. در دستگاه مختصات استوانه‌ای معادله (4) به صورت زیر بازنویسی می‌گردد با توجه به تقارن استوانه‌ای در ساختارها از وابستگی پتانسیل به مختصات سمتی φ صرفه‌نظر می‌کنیم.

$$\left(\frac{\partial}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial z^2}\right)V_c(r,z)=-\frac{\rho(r,z)}{\varepsilon} \quad (5)$$

چگالی توزیع بار شامل حامل‌های رسانشی آزاد (الکترون‌ها و حفره‌ها) و حامل‌های اهداکننده یا پذیرنده یونیزه به صورت رابطه (6) است

$$\rho(\mathbf{r})=\rho_d+\rho_h+\rho_e=-e\left[\left(N_a^- - N_d^+\right)+\left(p_h-n_e\right)\right] \quad (6)$$

که e بار الکترون N_d^+ چگالی کل دهنده‌های یونیزه شده، N_a^- چگالی کل پذیرنده‌های یونیزه شده، n_e چگالی الکترون در نوار رسانش و p_h چگالی حفره‌های رسانشی هستند. انرژی پتانسیل $U(\boldsymbol{r})$ و پتانسیل الکتروستاتیکی $V(\boldsymbol{r})$ از طریق رابطه (7) به هم مربوط می‌شوند

$$U(\mathbf{r})=-eV(\mathbf{r})+\Delta E_l \quad (7)$$

ΔE_l اختلاف انرژی نواری می‌باشداست و برای محاسبه چگالی حامل‌ها از شمارش تعداد حالات اشغال شده حامل‌ها (رابطه (8)) و توزیع مکانی حامل‌ها استفاده می‌گردد [18].

$$n_e=\sum_a n_a\left|\left(\psi_e\right)_a\right|^2,\ p_h=\sum_b p_b\left|\left(\psi_h\right)_b\right|^2 \quad (8)$$

که جمع بر روی پارامترهای b و a یعنی تعداد حالت‌های محدود شده، است و n_a, p_b به ترتیب تعداد حفره‌ها و الکترون‌های اشغال شده در زیر لایه b و aام از تابع موج $(\psi_e),(\psi_h)$ مربوط به حفره‌ها و الکترون‌ها هستند. برای محاسبه تعداد حامل‌ها باید روی چگالی حالت‌ها با توزیع فرمی دیراک به صورت زیر انتگرال‌گیری کرد.

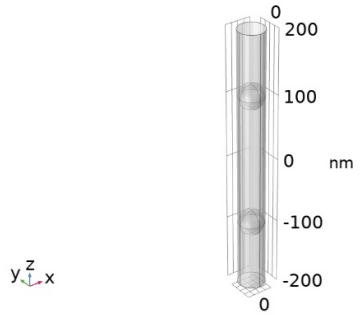
$$n_b=\int_{E_b}^{\infty}\frac{D(E)}{1+\exp\left(\frac{E-E_f}{k_BT}\right)}dE \quad (9)$$

در این رابطه T دمای انتخابی برای محاسبات خودسازگار E_f انرژی فرمی و E_b انرژی ترازهای به دست آمده از حل معادله شرودینگر است که توسط الکترون اشغال شده و k_B ثابت بولتزمن است. روش حل معادله خودسازگار پواسون- شرودینگر

به این صورت است که ابتدا با یک پتانسیل داده شده معادله شرودینگر را حل کرده، ویژه توابع و ویژه مقادیر انرژی را محاسبه و با استفاده از ویژه توابع و معادلات مربوطه، تابع چگالی الکترونی و عدد اشغال محاسبه می‌گردد. سپس قادر به حل معادله پواسون برای به دست آوردن پتانسیل جدید اعمال شده بر الکترون خواهیم بود. بعد از به دست آوردن پتانسیل جدید و چگالی الکترونی جدید آنها را با مقادیر قبلی مقایسه می‌کنیم، اگر اختلاف به نسبت بزرگ باشد محاسبات را تکرار می‌کنیم و این روند را تا زمان همگرایی جواب‌ها ادامه می‌دهیم. در این صورت تابع موج به صورت همزمان جواب معادله شرودینگر و پواسون خواهد بود.

بحث و بررسی نتایج

ساختار مطالعه شده همان طور که در شکل 1 نمایش داده شده، دو کره کوانتومی که درون سیم کوانتومی به صورت متقارن نسبت به مبدا قرار گرفته‌اند، است. سیم کوانتومی از جنس گالیوم - آرسناید به شعاع $R = 20\ \mathrm{nm}$ و طول $L = 400\ \mathrm{nm}$ و کره‌های کوانتومی از جنس ایندیوم آرسناید به شعاع $R = 10\ \mathrm{nm}$ که به صورت متقارن در مکان‌های $Z = +100\ \mathrm{nm}$ و $Z = -100\ \mathrm{nm}$ قرار گرفته‌اند، پتانسیل و جرم موثر در قسمت‌های مختلف ساختار متفاوت و به صورت زیر هستند. پارامترها مشابه پارامترهای مرجع [19] ارائه شده توسط کالیفانو و هریسون استفاده شده است.



شکل 1. ساختار دو کره کوانتومی متقارن درون یک سیم کوانتومی به شعاع $R = 20\ \mathrm{nm}$ و طول $L = 400\ \mathrm{nm}$

$$v = \begin{cases} v_1 = 0 & \textit{in the quantum dot} \\ v_2 = 450\ meV & \textit{in the quantum wire} \\ v_3 = \infty & \textit{out of quantum wire} \end{cases}$$

$$m = \begin{cases} m_w & \textit{in the quantum dot} \\ m_b & \textit{in the quantum wire} \end{cases}$$

دو شرط مرزی در حل مسئله عبارتند از شرط مرزی بین کره‌های کوانتومی و سیم کوانتومی که پیوستگی تابع موج و مشتق آن است و همچنین شرط بین سطوح سیم کوانتومی و فضای بیرون، که غیر قابل نفوذ برای سیم کوانتومی در نظر گرفته می‌شود. در گام اول ابتدا نتایج به دست آمده از حل عددی را با حل تحلیلی معادله شرودینگر در یک سیم کوانتومی، زمانی که کره‌های کوانتومی خیلی کوچک و شعاع آنها نزدیک به صفر در نظر گرفته شده است، مقایسه و دقت و صحت روش به کار رفته اعتبارسنجی می‌گردد و سپس سایر بررسی‌ها روی ساختار انجام خواهد شد. حل تحلیلی معادله شرودینگر برای یک نانو سیم استوانه‌ای به صورت رابطه شماره (10) است [2].

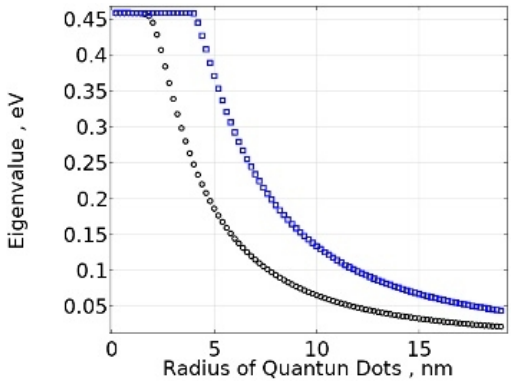
$$E_{n,m,i} = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\left(\frac{\alpha_{m,i}}{R}\right)^2 + \left(\frac{\pi p}{l}\right)^2\right] \tag{10}$$

پارامتر $\alpha_{m.i}$ ریشه i ام تابع بسل $J_m(\alpha_{m.i}) = 0$ است. با مقایسه مقادیر به دست آمده از دو روش، همگرایی خوبی بین نتایج به دست آمد، که تاییدی بر صحت و دقت حل عددی معادله است. جدول 1 ویژه مقادیر حالت پایه و اولین حالت برانگیخته الکترون را جهت سیم کوانتومی ذکر شده و با استفاده از نرم‌افزار کامسول نشان می‌دهد، همچنین نتایج محاسبات با حل تحلیلی نیز نمایش داده شده است. اختلاف نتایج به دست آمده از دو روش یک درصد است که تطابق خوبی بین نتایج عددی و نتایج تحلیلی نشان می‌دهد.

جدول 1. مقایسه حل تحلیلی و عددی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته انرژی

	حل عددی(mev)	حل تحلیلی(mev)	درصد خطا
انرژی حالت پایه	458.32	463.2678	%1
انرژی حالت برانگیخته اول	458.43	463.3031	%1

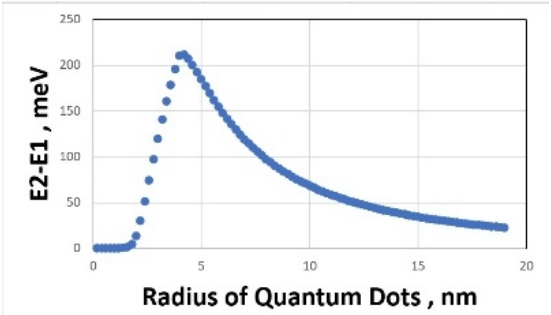
با اطمینان از درستی محاسبات، در ادامه حل معادله شرودینگر با تغییر شعاع دو کره کوانتومی به صورت یکسان از دو آنگستروم تا شعاع نزدیک به شعاع سیم کوانتومی، برابر 19 نانومتر انجام می‌گردد، که نتایج ویژه مقادیر حالت پایه و اولین حالت برانگیخته در شکل 2 نمایش داده شده است.



شکل 2. ویژه مقادیر حالت پایه (دایره مشکی) و اولین حالت برانگیخته (مربع آبی) نانو ساختار

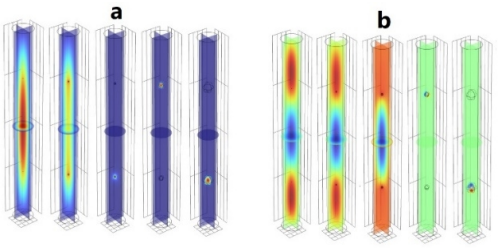
همان طور که در شکل 2 مشاهده می‌گردد، در شعاع‌های

کمتر از 2 نانومتر، تغییر قابل توجهی در ویژه مقادیر به دست آمده نسبت به حالت سیم کوانتومی تنها مشاهده نمی‌شود و بیانگر این موضوع است که حامل‌ها بدون احساس وجود نقاط کوانتومی در سیم کوانتومی حرکت می‌کنند. نتایج مشابه نیز برای مسئله یک نقطه کوانتومی در سیم کوانتومی [2] محاسبه شده است. با افزایش شعاع کره‌های کوانتومی، ویژه مقادیر انرژی کمتر می‌شوند تا در نزدیکی شعاع سیم کوانتومی و در داخل کره به کمترین مقدار خود با کمترین اثرپذیری از سیم کوانتومی نزدیک شوند. همچنین با کاهش شعاع، انرژی تراز پایه (و بقیه ترازها) به سمت V_0، پتانسیل سیم کوانتومی، میل می‌کند که بیانگر این موضوع است که با کاهش شعاع، الکترون از قید نقطهٔ کوانتومی رها می‌شود و آزادانه در محیط خارج از نقطهٔ کوانتومی و در داخل استوانه حرکت می‌کند. با توجه به اینکه شکل دارای تقارن استوانه‌ای است، تبهگنی ویژه مقادیر وجود ندارد. با افزایش شعاع کره‌های کوانتومی از شعاع 2 نانومتر، تبهگنی دوگانه در دومین حالت برانگیخته به وجود می‌آید ولی اولین حالت برانگیخته و حالت پایه فاقد تبهگنی هستند، از شعاع 4/5 نانومتر علاوه بر تبهگنی حالت پایه در اولین حالت برانگیخته تبهگنی چهارگانه داریم که تبهگنی‌های به وجود آمده به دلیل تقارن ساختار یعنی وجود دو نقطه کوانتومی متقارن، است. شکل 3 اختلاف ویژه مقادیر انرژیِ حالت پایه و اولین حالت برانگیخته را نمایش می‌دهد.



شکل 3. اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته نانو ساختار

در شعاع 4 نانومتر مقدار ماکزیمم اختلاف برابر 211 میلی الکترون ولت است. در شعاع‌های کمتر از دو نانومتر این اختلاف نزدیک به صفر است که مجددا نشان دهنده این موضوع است که حامل‌ها بدون احساس نقاط کوانتومی در سیم کوانتومی حرکت می‌کنند و در نقطه کوانتومی وجود ندارند و همانند سیم کوانتومی تنها، اختلاف زیادی بین ویژه مقادیر وجود ندارد. نکته قابل توجه این است که با وجود دو نقطه کوانتومی در ساختار، تغییر قابل توجهی در مقادیر انرژی نسبت به ساختار یک کره کوانتومی در مرکز یک سیم کوانتومی وجود ندارد [2]. در شکل 4 ویژه توابع حالت پایه و اولین حالت برانگیخته برای کره‌های کوانتومی 10 nm، 5، 2، 1، 0/2 نمایش داده شده است.



شکل 4. ویژه توابع حالت پایه (a) و اولین حالت برانگیخته (b) شعاع کره‌ها به ترتیب ازسمت راست 0,2، 1، 2، 5 و 10 نانومتر است

با توجه به نمودار ویژه توابع در شعاع‌های کمتر از 0/5 نانومتر، ویژه توابع طوری رفتار می‌کنند که گویی کره‌های کوانتومی در ساختار وجود ندارد و الکترون‌ها در خارج از نقطه کوانتومی و در سیم کوانتومی قرار دارند، با بزرگ‌تر شدن شعاع کره‌های کوانتومی تا یک نانومتر به آهستگی تاثیر کره‌های کوانتومی مشخص شده و همان طور که از نمودار مربوط به کره‌های با شعاع 1 نانومتر مشخص است، احتمال حضور الکترون در اطراف کره‌ها بیشتر می‌گردد. با بزرگ‌تر شدن شعاع کره‌ها احتمال حضور الکترون‌ها به طور کامل در کره‌های کوانتومی وجود دارد و به دلیل اینکه دو کره به صورت متقارن وجود دارند تبهگنی نیز به وجود می‌آید.

ساختار بعدی که بررسی خواهد شد ساختار سیم کوانتومی آلاییده از جنس گالیوم آرسناید با تغییر مقادیر آلایش است، در این ساختار پتانسیل روی سطح استوانه، برابر صفر در نظر گرفته شده است که با کمک معادله پواسون – شرودینگر بررسی و ویژه مقادیر از این روش محاسبه می‌گردد، نتایج به دست آمده در جدول 2 گزارش شده است.

جدول 2. ویژه مقادیر سیم کوانتومی با شعاع 20 نانومتر و ارتفاع 400 نانومتر بر حسب الکترون ولت با مقادیر مختلف آلایش

آلایش انجام شده در نانو سیم کوانتومی	ویژه مقادیر حالت پایه (eV)	ویژه مقادیر اولین حالت برانگیخته (eV)
$Nd = 2' 10^{18}$	0.20946	0.20962
$Nd = 8' 10^{17}$	0.36315	0.36330
$Nd = 2' 10^{17}$	0.43570	0.43585
$Nd = 2' 10^{16}$	0.45606	0.45617
$Nd = 2' 10^{15}$	0.45804	0.45814
بدون ناخالصی	0.45826	0.45836

همان طور که قابل انتظار است، در ویژه مقادیر به دست آمده از حل معادله پواسون – شرودینگر هر چه میزان آلایش حامل‌ها بیشتر می‌شود، تاثیر آن بر ویژه مقادیر محاسبه شده بیشتر می‌گردد و هر چه مقدار ناخالصی کمتر باشد به نتایج به دست آمده از حل معادله شرودینگر که مستقل از آلایش اعمال شده است، نزدیکتر می‌شود.

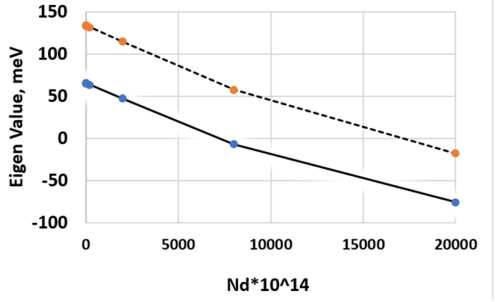
در این قسمت ساختار دو کره کوانتومی از جنس ایندیوم آرسناید درون سیم کوانتومی از جنس گالیوم آرسناید، با کمک معادله پواسون – شرودینگر مطالعه می‌شود. دو کره کوانتومی با شعاع 10 نانومتر است که به فاصله 200 نانومتر از هم و درون سیم کوانتومی با شعاع 20 و ارتفاع 400 نانومتر قرار دارند، پتانسیل بر روی سطح استوانه برابر صفر در نظر گرفته می‌شود و در ساختار فوق کره‌های کوانتومی بدون آلایش و استوانه کوانتومی با ماده دهنده نوع n آلایش یافته است.

ابتدا تغییرات ویژه مقادیر انرژی با تغییر آلایش استوانه کوانتومی بررسی می‌شود.

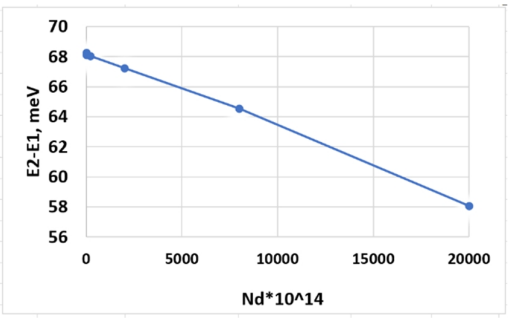
جدول 3. ویژه مقادیر دو کره کوانتومی با شعاع 10 نانومتر درون سیم کوانتومی با شعاع 20 نانومتر و ارتفاع 400 نانومتر با مقادیر مختلف آلایش بر حسب الکترون ولت نمایش داده شده است.

آلایش انجام شده در نانو سیم کوانتومی	ویژه مقادیر حالت پایه (eV)	ویژه مقادیر اولین حالت برانگیخته (eV)
$Nd = 2' 10^{18}$	-0.07573	-0.01767
$Nd = 8' 10^{17}$	-0.00719	0.05735
$Nd = 2' 10^{17}$	0.04715	0.11439
$Nd = 2' 10^{16}$	0.06343	0.13148
$Nd = 2' 10^{15}$	0.06506	0.13319
$Nd = 2' 10^{14}$	0.06522	0.13348
بدون ناخالصی	0.06524	0.13338

همان طور که قابل انتظار است و در ساختار سیم کوانتومی نیز مشاهده گردید، در ویژه مقادیر به دست آمده از حل معادله پواسون – شرودینگر هر چه میزان آلایش حامل‌ها بیشتر می‌گردد، تاثیر آن بر ویژه مقادیر محاسبه شده بیشتر شده و هر چه مقدار آلایش کمتر باشد به نتایج به دست آمده از روش حل معادله شرودینگر نزدیک‌تر می‌شود و به این دلیل است که نتایج حاصل از حل معادله شرودینگر مستقل از آلایش اعمال شده است.



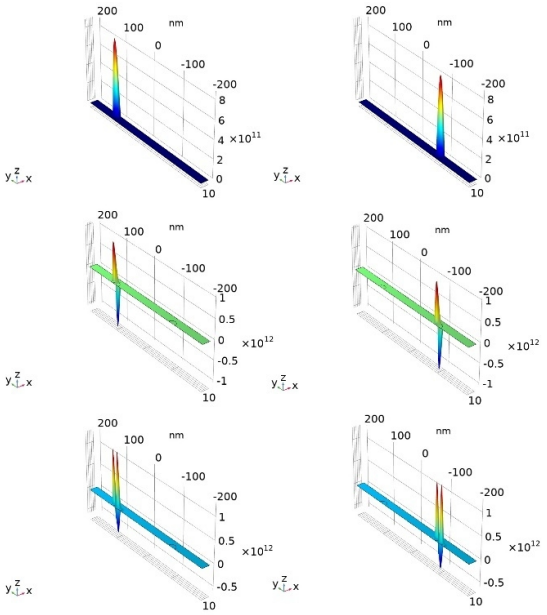
شکل 5. ویژه مقادیر انرژی حالت پایه (خط پیوسته) و اولین حالت برانگیخته (خط چین) ساختار دو کره کوانتومی درون سیم کوانتومی بر حسب آلایش‌های مختلف



شکل 6. اختلاف ویژه مقادیر انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته ساختار دو کره کوانتومی درون سیم کوانتومی با تغییرات آلایش

همان طور که در شکل 5 و شکل 6 مشخص است، با افزایش غلظت آلایش مقادیر به دست آمده جهت ویژه مقادیر انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته همچنین اختلاف این دو کمتر می‌گردید یعنی سطوح ترازها به هم نزدیک‌تر می‌گردند و انرژی گذار کاهش می‌یابد که این موضوع می‌تواند به این دلیل باشد که آلاییدن نانوسیم با اتم‌های اهدا کننده موجب خمیدگی نوار رسانش می‌شود و با افزایش غلظت اهدا کننده این خمیدگی افزایش می‌یابد.

در ادامه ویژه توابع ساختار از حل معادله پواسون - شرودینگر بررسی خواهد شد.

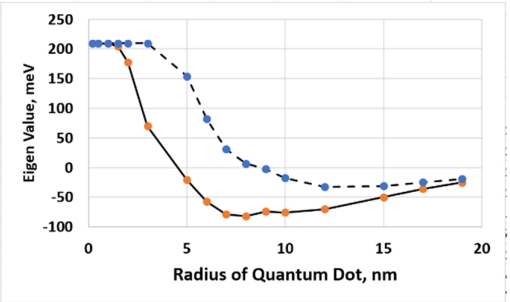


شکل 7. شش ویژه تابع اول ساختار دو کره کوانتومی با شعاع 10 نانومتر درون سیم کوانتومی با شعاع 20 نانومتر و آلایش $Nd = 2' 10^{18}$

در شکل 7، شش ویژه تابع اول ساختار دو کره کوانتومی درون سیم کوانتومی با حل معادله پواسون - شرودینگر و آلایش $Nd = 2' 10^{18}$ نمایش داده شده است. ویژه توابع، مشابه نتایج به دست آمده از روش قبل یعنی حل معادله شرودینگر در ساختار کره‌های کوانتومی در استوانه کوانتومی است و به دلیل تقارن ساختار، دارای تبهگنی دوگانه در ویژه توابع حالت پایه و

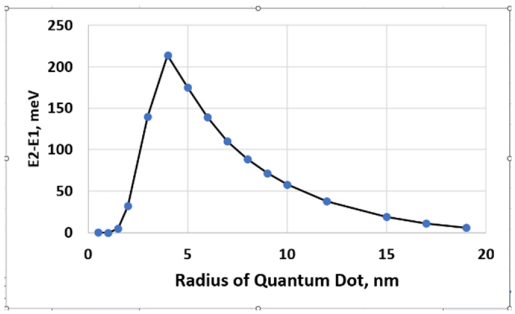
اولین حالت برانگیخته است.

در شکل 8 ویژه مقادیر انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته بر حسب شعاع کره‌های کوانتومی و آلایش $Nd = 2´10^{18}$ نمایش داده شده است.



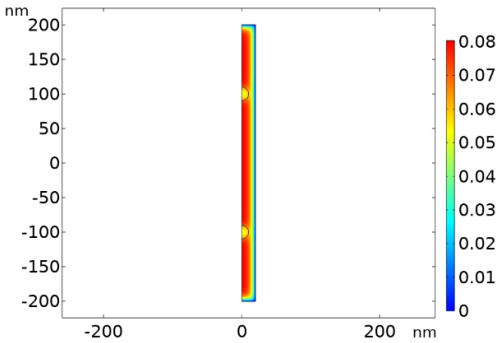
شکل 8. ویژه مقادیر انرژی حالت پایه (خط پیوسته) و اولین حالت برانگیخته (خط چین) با تغییرات شعاع کره‌های کوانتومی و آلایش $Nd = 2´10^{18}$

ویژه مقادیر حالت پایه از مقدار ماکزیمم در شعاع‌های کوچک کره کوانتومی شروع می‌شود و با افزایش شعاع به مقدار مینیمم می‌رسد و سپس با افزایش بیشتر شعاع مقدار کمی افزایش می‌یابد. در شکل 9، اختلاف ویژه مقادیر انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته با تغییرات شعاع کره‌های کوانتومی و آلایش $Nd = 2´10^{18}$ نمایش داده شده است.

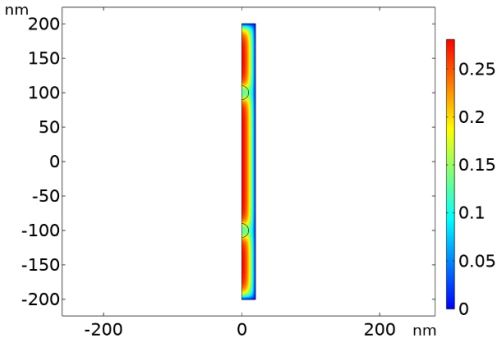


شکل 9. اختلاف ویژه مقادیر انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته با تغییرات شعاع کره‌های کوانتومی و آلایش $Nd = 2´10^{18}$

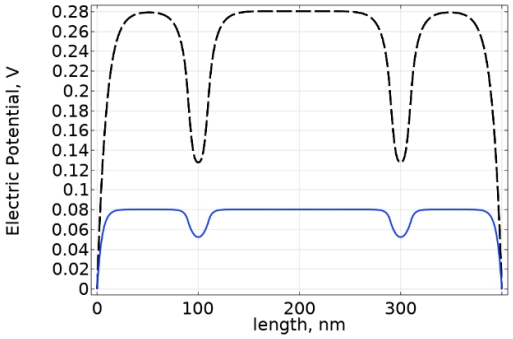
شکل شماره 9 نشان می‌دهد که با افزایش شعاع کره‌های کوانتومی اختلاف ویژه مقادیر افزایش و در شعاع 5 نانومتر به حداکثر مقدار خود یعنی 213 میلی الکترون ولت رسیده و سپس این مقدار کاهش می‌یابد که رفتاری مشابه ساختار بدون آلایش دارد. در شکل شماره 10 پتانسیل الکتریکی ساختار را به روش توماس فرمی و در شکل شماره 11 پتانسیل الکتریکی به روش پواسون – شرودینگر و در شکل شماره 12 مقایسه مقادیر حاصل شده از این دو روش در راستای خط مرکزی سیم کوانتومی در یک بعد و در راستای محور Z، نمایش داده شده است.



شکل 10. پتانسیل الکتریکی به‌دست آمده از روش توماس فرمی برای کره‌های کوانتومی به شعاع 10 نانومتر و آلایش $Nd = 2´10^{18}$



شکل 11. پتانسیل الکتریکی به‌دست آمده از حل معادله پواسون – شرودینگر برای کره‌های کوانتومی به شعاع 10 نانومتر و آلایش $Nd = 2´10^{18}$



شکل 12. مقایسه پتانسیل الکتریکی به دست آمده از روش توماس فرمی (خط آبی پیوسته) و حل معادله پواسون – شرودینگر (خط چین مشکی) برای کره‌های کوانتومی به شعاع 10 نانومتر و آلایش $Nd = 2´10^{18}$

درکره‌های کوانتومی به علت حضور الکترون‌ها و افزایش غلظت آلایش، عرض منطقه تخلیه کاهش می‌یابد و این منجر به کاهش تغییرات و عمق پتانسیل الکتروستاتیکی ساختار می‌شود و این تغییرات به نوبهٔ خود افزایش چگالی حامل‌ها در داخل نقطه و اطراف آن را به همراه دارد، این افزایش الکترون‌ها تا زمانی که دافعه الکترون‌ها باعث به تعادل رسیدن شود ادامه پیدا می‌کند.

محاسبات انجام شده در ساختارهای با آلایش و حل معادله پواسون – شرودینگر در دمای ده درجه کلوین انجام شد. تغییر دما باعث تغییر در پارامترهای مختلف نیم‌هادی مانند جرم مؤثر،

ثابت دی الکتریک، چگالی حالت‌ها و... می‌شود. با تغییر دما به عنوان یک عامل موثر در تعیین پارامترهای مختلف مواد می‌توان به بررسی خصوصیات فیزیکی سیستم‌های با ابعاد پایین پرداخت. همچنین پارامترهای ذکر شده علاوه بر وابستگی به دما به فشار هیدرواستاتیکی نیز وابسته می‌باشند. در این بررسی ما تاثیر دما را روی چگالی حالت‌ها از طریق ارتباط آن با معادله فرمی دیراک و در نتیجه اثر آن روی خصوصیات الکترونی ساختار بررسی می‌کنیم.

جدول 4. ویژه مقادیر دو کره کوانتومی با شعاع 5 نانومتر درون سیم کوانتومی با شعاع 20 نانومتر و ارتفاع 400 نانومتر با آلایش $Nd = 2\acute{}\ 10^{18}$ با مقادیر مختلف دما بر حسب الکترون ولت نمایش داده شده است.

دما (°K)	ویژه مقادیر حالت پایه (eV)	ویژه مقادیر اولین حالت برانگیخته(eV)
10	0.11641	0.20961
100	0.11641	0.20961
200	0.11645	0.20961
300	0.11682	0.20961

جهت بررسی اثر دما بر روی ساختار، افزایش دما از دمای ده درجه کلوین تا دمای اتاق انجام شد که همان طور که در جدول 4 نشان داده شده است تغییرات قابل توجهی در ویژه مقادیر و همچنین شکل ویژه توابع مشاهده نمی‌شود. البته همچنان که می‌دانیم دمای فرمی یک گاز الکترونی برای غلظت آلایش بررسی شده خیلی بیشتر از دمای اتاق است و دمای اتاق معادل دمای صفر برای این غلظت آلایش است و بر این اساس، نمی‌توان بین نتایج در دماهای کمتر از دمای اتاق تمایز قائل شد؛ و تغییرات ساختار الکترونی در دمای اتاق و کمتر از آن تحت تاثیر قابل مشاهده قرار نمی‌گیرد.

بحث و نتیجه‌گیری

ویژه مقادیر و ویژه توابع نقطه‌های کوانتومی کروی جایگزیده به صورت متقارن نسبت به مرکز سیم کوانتومی محاسبه گردید و نتایج به دست آمده در حالتی که نقطه‌های کوانتومی کروی بسیار کوچک هستند با محاسبات تحلیلی سیم کوانتومی مقایسه گردید که همگرایی مطلوبی وجود دارد، همچنین با افزایش شعاع کره‌های کوانتومی توابع موج در کره‌ها قرار گرفته و نتایج ویژه مقادیر مشابه نتایج ساختار کره کوانتومی در مرکز سیم کوانتومی است با این تفاوت که به دلیل تقارن، تبهگنی ظاهر شد. رفتار ویژه مقادیر و ویژه توابع با بزرگ شدن شعاع کره‌های کوانتومی در حضور ناخالصی مشابه رفتار آنها بدون حضور ناخالصی است. سپس معادله پواسون - شرودینگر در ساختار سیم کوانتومی و دو کره کوانتومی درون سیم کوانتومی با مقادیر مختلف آلایش بررسی گردید که اثر افزایش آلاییده شدن بر روی ویژه مقادیر به دست آمده، قابل توجه و با کاهش مقادیر آن، نتایج به نتایج حاصل از حل معادله شرودینگر نزدیک گردید، که توانایی و اهمیت استفاده ازمعادله پواسون - شرودینگر در بررسی نانوساختارهای آلاییده نشان داده شده است. در حالی که محاسبات نشان داد که تاثیر دما از دماهای پایین تا دمای محیط ناچیز ولی تاثیر تغییرات شعاع‌های درونی و مقادیر ناخالصی آلاییده شده بر خصوصیات الکترونی نانو ساختار قابل ملاحظه و قابل محاسبه است.

منابع

[1] P. Harrison, A. Valavanis, Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures, John Wiley & Sons 2016.

[2] G. Safarpour, M. Barati, M. Vahdani, Electron–hole transition energy for a spherical quantum dot confined in a nano-cylindrical wire, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 44. 2011, 728-732.

[3] J.C. Martínez-Orozco, M.E. Mora-Ramos, C.A. Duque, Nonlinear optical rectification and second and third harmonic generation in GaAs δ-FET systems under hydrostatic pressure, Journal of luminescence, 132. 2012, 449-456.

[4] I. Karabulut, M. Mora-Ramos, C. Duque, Nonlinear optical rectification and optical absorption in GaAs–Ga1–xAlxAs asymmetric double quantum wells: Combined effects of applied electric and magnetic fields and hydrostatic pressure, Journal of Luminescence, 131. 2011, 1502-1509.

[5] H. Dakhlaoui, S. Almansour, E. Algrafy, Effect of Si δ-doped layer position on optical absorption in GaAs quantum well under hydrostatic pressure, Superlattices and Microstructures, 77. 2015, 196-208.

[6] E.C. Niculescu, N. Eseanu, A. Radu, Heterointerface effects on the nonlinear optical rectification in a laser-dressed graded quantum well, Optics Communications, 294. 2013, 276-282.

[7] E. Kasapoglu, C. Duque, H. Sari, I. Sökmen, Intense laser field effects on the linear and nonlinear intersubband optical properties of a semi-parabolic quantum well, The European Physical Journal B, 82. 2011, 13-17.

[8] G. Safarpour, M. Izadi, M. Novzari, S. Yazdanpanahi, Anisotropy effect on the linear and nonlinear optical properties of a lased dressed donor impurity in a GaAs/GaAlAs

nanowire superlattice, Superlattices and Microstructures, 75. 2014, 936-947.

[9] G. Safarpour, M. Izadi, M. Novzari, E. Niknam, M. Moradi, Anisotropy effect on the nonlinear optical properties of a three-dimensional quantum dot confined at the center of a cylindrical nano-wire, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 59. 2014, 124-132.

[10] G. Safarpour, M. Izadi, E. Niknam, M. Moradi, M. Golshan, Simultaneous effects of external electric field and aluminum concentration on the binding energy of a laser-dressed donor impurity in a spherical quantum dot confined at the center of a cylindrical nano-wire, Physica B: Condensed Matter, 436. 2014, 14-19.

[11] M. Moradi, M. Moradi, The Effects of Temperature and Electric Field on the Electronic and Optical Properties of an InAs Quantum Dot Placed at the Center of a GaAs Nanowire, Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 16. 2022, 1237-1247.

[12] M. Jaouane, A. Sali, A. Ezzarfi, A. Fakkahi, R. Arraoui, Study of hydrostatic pressure, electric and magnetic fields effects on the donor binding energy in multilayer cylindrical quantum dots, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 127. 2021, 114543.

[13] M. Chubrei, V. Holovatsky, C. Duque, Effect of magnetic field on donor impurity-related photoionisation cross-section in multilayered quantum dot, Philosophical Magazine, 101. 2021, 2614-2633.

[14] J.A. Gil-Corrales, J.A. Vinasco, A. Radu, R.L. Restrepo, A.L. Morales, M.E. Mora-Ramos, C.A. Duque, Self-consistent schrödinger-poisson study of electronic properties of gaas quantum well wires with various cross-sectional shapes, Nanomaterials, 11. 2021, 1219.

[15] M. Jaouane, A. Sali, A. Fakkahi, R. Arraoui, F. Ungan, The effects of temperature and pressure on the optical properties of a donor impurity in. In, Ga, N/GaN multilayer cylindrical quantum dots, Micro and Nanostructures, 16. 2022, 107146.

[16] S. Uslu, Z. Yarar, Self consistent solution of Schrödinger Poisson equations and some electronic properties of ZnMgO/ZnO hetero structures, AIP Conference Proceedings, 1815. 2017, 050017.

[17] I. Bouneb, F. Kerrour, Nanometric modelization of gas structure, multidimensional using comsol software, International Journal of Electrical and Computer Engineering, 8. 2018, 2014.

[18] M. Moradi, M. Moradi, S. Elahi, S. Parhizgar, Electronic and Optical Properties of Quantum Dot Surrounded by Doped Cylindrical Nanowire, Acta Physica Polonica, A., 138. 2020,561-569.

[19] M. Califano, P. Harrison, Presentation and experimental validation of a single-band, constant-potential model for self-assembled InAs/GaAs quantum dots, Physical Review B, 61. 2000, 10959.