

مقاله پژوهشی

DOR: [20.1001.1.24767131.1401.8.2.10.0](https://doi.org/10.1001.1.24767131.1401.8.2.10.0)

درصد همانندی: ۶٪

## طراحی آشکارساز امواج مادون قرمز با استفاده از یک سیستم شامل دو نقطه کوانتومی کروی درون کره کوانتومی آلاییده به کمک حل معادله پواسون-شروودینگر

محمد رضا فرهمند<sup>۱</sup>، محمود مرادی<sup>۲\*</sup>، عبدالرسول قرائتی<sup>۳</sup>

mfarahmand@pnu.ac.ir

<sup>۱</sup> دکتری، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

mmoradi@shirazu.ac.ir

<sup>۲\*</sup> نویسنده مسئول، استاد، بخش فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، شیراز، ایران

agharaati@pnu.ac.ir

<sup>۳</sup> استاد، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۱۲/۰۷

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۱۰/۲۴

### چکیده

ساختارهای کوانتومی نیمه هادی به عنوان یکی از منابع پیشرفته در تولید نور هستند و اعمال آلایش به آنها باعث تحول در خصوصیات الکترونی و الکترواپتیکی آنها می شود، بنابراین بررسی خصوصیات آنها اهمیت ویژه ای دارد و در سال های اخیر به عنوان یک موضوع پژوهشی نو و با کاربردهای فراوان مورد توجه دانشمندان و صنعتگران قرار گرفته است. در این مطالعه خصوصیات الکترونی و در نتیجه خصوصیات نوری دو نقطه کوانتومی کروی از جنس ایندیوم آرسناید درون کره کوانتومی گالیوم آرسناید بررسی شده است. برای رسیدن به این هدف ابتدا معادله شرودینگر در ساختارهای گفته شده با روش المان محدود و تقریب جرم مؤثر بررسی شد و نتایج حاصله مانند ویژه توابع و ویژه مقادیر انرژی و سایر ویژگی های به دست آمده با نتایج حاصل از کارهای مشابه تحلیلی مقایسه شده است. سپس با تزریق مقادیر مختلف ناخالصی و استفاده از معادله خودسازگار پواسون-شروودینگر، اثر ناخالصی ها بر خصوصیات الکترونی و نوری ساختار مورد بررسی و با نتایج حاصل از حل معادله شرودینگر در شرایط حدی مقایسه شد. نرم افزار استفاده شده در این بررسی کامسول است. نتایج به دست آمده حاکی از تأثیر مقادیر ناخالصی آلاییده شده و شعاع های نانو ساختارهای درونی بر خصوصیات فیزیکی این نانو ساختار است. بدین ترتیب با تغییر پارامترهای مطرح شده، امکان محاسبه اختلاف انرژی اولین حالت برانگیخته و حالت پایه فراهم می شود. محاسبات نشان می دهد که با توجه به این اختلاف انرژی امکان طراحی آشکارسازهای مادون قرمز با بازه نسبتاً وسیع فراهم می شود.

**واژه های کلیدی:** آشکارساز، کره کوانتومی، معادله خودسازگار، روش المان محدود، خصوصیات الکترونی

## ۱. مقدمه

با پیشرفت‌های سریع فناوری مدرن مانند لایه نشانی شیمیایی<sup>۱</sup> و دیگر روش‌های بسیار دقیق و برآرایی مولکولی<sup>۲</sup> امکان تولید نانو ساختارها به‌ویژه نیمه‌هادی‌ها در ابعاد و ساختارهای مختلف و بسیار ریز در حد چند نانومتر امکان پذیر شده است و همین موضوع گستره وسیعی از کاربردهای الکترونی، الکترواپتیکی، مکانیکی و امکان تولید آشکارسازها و حسگرها را برای ما فراهم می‌کند. در سال‌های اخیر توجه زیادی نسبت به مطالعه و پژوهش درباره خواص فیزیکی نیمه‌هادی‌های نامتقارن با ابعاد کم، مانند چاه‌های کوانتومی، سیم‌ها و نقاط کوانتومی و ترکیباتی از این دسته نانو ساختارها صورت گرفته است. این سیستم‌ها هم به صورت نظری و هم به صورت تجربی بررسی و مطالعه شده‌اند [۱]. مطالعه درباره این ساختارها یک نگرش جدید در فیزیک حالت جامد به وجود آورده است و در نتیجه آن کاربردهای بالقوه بسیاری را برای ابزارهای الکترونیکی و الکترواپتیکی مانند مدولاتورهای الکترواپتیکی سرعت بالا [۲]، ترانزیستورهای اثر میدانی [۳]، شناساگرهای مادون قرمز [۴]، ابزارهای محاسبات کوانتومی، حافظه‌های اپتیکی و لیزرهای نیمه‌هادی [۵] را امکان پذیر نموده‌اند.

به دلیل کاربردهای وسیع در فناوری، ساختارهای کوانتومی اعم از ساختارهای تکی و چندتایی به‌طور گسترده در شرایط فیزیکی مختلف مثل فشار هیدرواستاتیکی، دما، اعمال میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی و لیزر و فرایند تزریق‌های مختلف و عواملی شبیه این موارد بررسی و مطالعه شده‌اند [۶-۹]. با در نظر گرفتن و به کار بردن شرایط مختلف، انرژی‌های حالت زیر لایه و توابع موج وابسته به آن‌ها، همچنین گاف نواری، قابلیت تنظیم و اصلاح را بسته به تقاضا مدنظر قرار داده‌اند. در نتیجه این تغییرات در خواص مواد می‌توان آن‌ها را برای به کارگیری مناسب در دستگاه‌های الکترونیکی و الکترواپتیکی مورداستفاده قرارداد؛ بنابراین با محدود کردن حامل موج‌ها در چاه‌ها و ساختارهای کوانتومی، سطوح با انرژی‌های مشخص در چاه تشکیل می‌شود که در اکثر ساختارهای نیمه‌هادی با حل معادله

شرودینگر در حضور این محدودیت‌ها قابل دستیابی است [۱۰، ۱۱].

خواص اپتیکی و دیگر خواص سیستم‌های نیمه‌رسانا نیز به‌وسیله دانشمندان زیادی در سال‌های اخیر بررسی شده است [۱۲-۱۸]. صفرپور و همکاران [۱۷، ۱۹] روش تفاضل محدود و رهیافت ماتریس چگالی به‌هم پیوسته را برای آنالیز اثر لیزر و ناهمگنی هندسی بر خصوصیات سیم‌های کوانتومی ابر شبکه GaAs/GaAlAs انجام دادند و اثر ناهمسانگردی بر خصوصیات غیرخطی نقطه کوانتومی سه‌بعدی محدود شده در مرکز یک استوانه سیم کوانتومی و اثر هم‌زمان میدان الکتریکی و لیزر و غلظت آلومینیوم بر انرژی بستگی ناخالصی‌های دهنده در سیستم گفته شده، همچنین انرژی بستگی در سیم کوانتومی متورم GaAs را محاسبه نمودند. داکو [۱۸] و دیگران حالت‌های اکسیتون در سیستم‌ها با تقریب جرم مؤثر و مدل پاد تقاطعی نواری به دست آورده‌اند. ال و همکاران [۲۰] اثرات میدان الکتریکی و مغناطیسی بر خواص اپتیکی غیرخطی چاه کوانتومی سهموی غیرمقارن دو تاییه GaAs/GaAlAs را بررسی کردند. همچنین اثر پهنا بر چاه کوانتومی چپ و دیواره‌های بیرونی و غلظت آلومینیوم روی خواص خطی و غیرخطی چاه کوانتومی دو تاییه توسط دخلویی [۲۱] مورد مطالعه قرار گرفت.

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 تأثیر حامل‌های تزریق شده و حامل‌های آزاد را در نظر گرفته است. حل معادله‌هایی از این روش به‌خوبی بیانگر تغییرات در حضور ناخالصی‌هاست. باز توزیع بار در داخل نانو ساختارها یا ساختارهای نامتجانس باعث به وجود آمدن پتانسیل الکتریکی و در نتیجه تغییر خصوصیات الکترونیکی و نوری ساختار می‌شود که در سال‌های اخیر بیشتر استفاده می‌شود [۲۲-۲۸]. با این روش مطالعه این خصوصیات برای سیم کوانتومی GaAs توسط جیمز و ساختارهای لایه‌ای با تزریق‌های مختلف توسط رام موهان [۲۹] انجام شد. همچنین مطالعه خصوصیات نانو سیم کوانتومی هسته و پوسته با تقارن

نامتجانس، الکترون تحت تأثیر پتانسیل ناشی از ناخالصی‌های یونیزه موجود در شبکه و سایر الکترون‌های شبکه قرار می‌گیرد که این پتانسیل بر ساختار نواری ساختار نامتجانس تأثیر گذاشته و تغییراتی در ساختار ترازهای انرژی به وجود می‌آورد. همچنین نحوه توزیع حامل‌ها و موقعیت تراز فرمی تحت تأثیر پتانسیل به وجود آمده قرار می‌گیرد. از آنجاکه حامل‌های بار در ناخالصی‌های آلائیده شده تمایل به کسب کمترین انرژی کل را دارند، بنابراین حالت‌هایی که کمترین انرژی کل دارند را اشغال خواهند کرد و این تغییر حالت الکترون‌ها باعث به وجود آمدن بار الکتریکی در چاه کوانتومی و بار مخالف در محل اتم‌های اهداکننده یا گیرنده به دلیل تغییر مواد تشکیل‌دهنده نانو ساختار می‌شود. این توزیع جدید بار باعث به وجود آمدن پتانسیل الکتریکی جدید می‌شود که دوباره باعث تغییرات در نوار رسانش و ظرفیت می‌شود. همگرایی پاسخ‌ها و یافتن پاسخی مناسب برای پتانسیل الکتروستاتیکی ساختار و ترازهای انرژی در حضور سایر الکترون‌ها و ناخالصی‌های آلائیشی با استفاده از محاسبات عددی پیچیدگی‌های خاص خود را دارد که حل معادله خودسازگار پواسون-شرویدینگر برای دستیابی به بهترین پاسخ این گونه روابط و ساختارها به ما کمک می‌کند.

برای محاسبه ویژه مقادیر انرژی، اختلاف ویژه مقدار حالت پایه و اولین حالت برانگیخته جهت محاسبه طول موجی که ساختار می‌تواند در آن طول موج جذب یا نشر انجام دهد لازم است، ابتدا معادله شرویدینگر تک ذره‌ای با تقریب جرم مؤثر را در دستگاه مختصات کروی حل کنیم. با قرار دادن محدودیت پتانسیل کروی متقارن معادله مستقل از زمان شرویدینگر در دستگاه مختصات کروی به صورت رابطه (1) بیان می‌شود.

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \varphi^2} \right] \psi_0 = E \psi_0 \quad (1)$$

$$\psi_0 + U(r)\psi_0 = E\psi_0$$

که تابع موج  $\psi_0$  تابعی از  $r, \theta, \varphi$  است در رابطه بالا  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  ثابت پلانک کاهش یافته،  $U(r)$  انرژی پتانسیلی ذره،  $m^*$  جرم

شعاعی توسط لینگون وانگ [۳۰] و برای یک دیواره سخت باردار شده توسط کریستین برلند [۳۱]، ساختارهای کوانتومی دوبعدی توسط ترلاکیش [۳۲] و ساختار ابر شبکه GaN/AlGaIn توسط پاتیل [۳۳]، ساختار نامتجانس ZnMgO/ZnO توسط سالیح اوسلو [۳۴] و ساختار نانو یک و دوبعدی و ساختار نامتجانس GaAs/AlGaAs توسط بونب [۳۵] انجام شد

همچنین مطالعه خصوصیات الکترونی سیم کوانتومی سطح مقطع‌های مختلف توسط گیل-کورالس [۳۶] و اثر فشار و دما بر خصوصیات نوری نقطه کوانتومی استوانه‌ای چندلایه (In; Ga)N/GaN با ناخالصی دونور توسط جاوان [۳۷] نیز با استفاده از روش حل معادله پواسون-شرویدینگر مطالعه شد.

در این مطالعه ما قصد داریم ابتدا خصوصیات الکترونی نانو ساختار دو نقطه کوانتومی در مرکز کره کوانتومی را با حل معادله شرویدینگر و با روش المان محدود و استفاده از نرم افزار کامسول محاسبه کرده و اثر پارامترهای هندسی از جمله تغییر شعاع را بر آن‌ها بررسی کرده، سپس با تزریق کردن مقادیر مختلف ناخالصی و استفاده از معادله پواسون-شرویدینگر اثر ناخالصی را بر خصوصیات الکترونی و نوری نانو ساختار مورد مطالعه قرار داده و پس از به دست آوردن، آن‌ها را با هم مقایسه کنیم. نکته مهم در این محاسبات مقایسه نتایج به دست آمده با یکدیگر است تا اثر محدودیت‌ها، نوع شکل هندسی و ارتباط بین انرژی و تابع موج را بررسی نموده و یک نظر نسبتاً کلی ارائه دهیم. در نهایت هدف این است که از این محاسبات در ساخت آشکارسازهای نوری در محدوده مادون قرمز در یک بازه نسبتاً مناسب با تغییر پارامترها شامل شعاع نقطه کوانتومی و میزان آلایش تزریق شده، آشکارسازها را طراحی نمود.

## ۲. تئوری

با صرف نظر کردن از برهم کنش بین الکترون‌های موجود در ساختار، با حل معادله شرویدینگر ترازهای انرژی، توابع ویژه و خصوصیات الکترونی و نوری ساختار قابل محاسبه و بررسی است، ولی در حالت کلی در ساختارهای کوانتومی

می‌شود که  $l$  و  $m$  اعداد کوانتومی مشخص کننده حالت و  $N_{lm}$  فاکتور بهنجارسازی است. این جواب‌های زاویه‌ای، هارمونیک کروی نامیده می‌شود. با قرار دادن  $\lambda = l(l+1)$  و انجام محاسبات ریاضی داریم.

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{2}{r} \frac{\partial \psi(r)}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi(r)}{\partial r^2} \right) \quad (6)$$

$$- \left( E - U(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m^* r^2} \right) \psi(r) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{2}{r} \frac{\partial \psi(r)}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi(r)}{\partial r^2} \right) \quad (7)$$

$$+ \left( U(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m^* r^2} \right) \psi(r) = E \psi(r)$$

که برای  $l=0$ ، معادله مشابه معادله شعاعی بدون اندازه حرکت زاویه‌ای است. عبارت  $l(l+1)\hbar^2/(2m^* r^2)$  به عنوان عبارت اضافه ناشی از اندازه حرکت زاویه‌ای است. حل این معادله نیاز به مشخص کردن پتانسیل  $V(r)$  دارد. یکی از حالت‌های پتانسیل می‌تواند به صورت  $V(r) = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$  باشد که منتج به حل مسئله اتم هیدروژن می‌شود. یکی دیگر از انتخاب‌های متداول پتانسیل می‌تواند عدد پتانسیل ثابت یا صفر برای درون نانو ساختار و پتانسیل بی‌نهایت برای خارج از نانو ساختار باشد که یک نقطه کوانتومی کروی با پتانسیل صفر یا ثابت را تعریف می‌کند. با استفاده از رابطه (7) می‌توان معادله شرودینگر را برای ساختارهای با تقارن کروی بررسی و خواص مرتبط را محاسبه نمود.

روش بررسی سیستم با حل معادلات خودسازگار پواسون-شرودینگر برای محاسبه سطوح انرژی یک ساختار نامتجانس یا محدود شده اهمیت خیلی زیادی دارد، از آن جهت که این روش در مقایسه با سایر روش‌ها، امکان توصیف دقیق تری از چگالی حجمی حامل‌های بار توزیع شده در حضور سایر حامل‌ها که در دستگاه‌های واقعی وجود دارد را ارائه می‌دهد. بیشترین تأثیر حامل‌های تزریق شده و حامل‌های آزاد در لبه نوارهاست و توزیع مجدد بار باعث تغییر نمای لبه نوار می‌شود که بررسی سیستم با حل معادلات پواسون-شرودینگر به خوبی بیانگر این تغییرات می‌باشد و اثر حامل‌ها به نحو مطلوبی در نظر گرفته می‌شود. باز توزیع بار در

مؤثر حامل که مقدار آن برای ساختارهای گوناگون، متفاوت و  $E$  ویژه مقادیر انرژی است.

برای حل معادله با کمک روش جداسازی متغیرها تابع موج را جداسازی نموده  $\psi_0 = \psi(r)Y(\theta, \phi)$  و با جایگذاری تابع موج و انجام کمی عملیات ریاضی معادله به دو قسمت تابعی از  $r$  و قسمت دوم تابعی از  $\theta, \phi$  تقسیم می‌شود.

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

$$= - \frac{1}{Y(\theta, \phi)} \left[ \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \right]$$

اگر طرفین رابطه برابر مقدار ثابت  $\lambda$  قرار دهیم، معادله قابل جداسازی است.

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

$$- \frac{1}{Y(\theta, \phi)} \left[ \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \left( \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \right) \right] = \lambda$$

با تعریف تابع  $Y(\theta, \phi)$  به صورت حاصل ضرب دو تابع مستقل و جدا از هم، دوباره جداسازی متغیرها را انجام می‌دهیم.

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (4)$$

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + \nu \Phi = 0$$

$$\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left( \sin(\theta) \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left( \lambda - \frac{\nu}{\sin^2(\theta)} \right) \Theta = 0$$

با یادآوری و در نظر گرفتن شرایط مرزی استاندارد، یعنی اینکه تابع موج در مرز بین صفر و  $2\pi$  پیوسته است، بنابراین  $\nu$  باید مثبت باشد، آن را مربع یک عدد صحیح  $m^2$  در نظر می‌گیریم که مقادیر مختلف عدد  $m$  نمایانگر جواب‌های مختلف مسئله است. در نتیجه می‌توان نوشت:

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (5)$$

جواب‌های زاویه‌ای  $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$  به صورت مجموعه‌ای از توابع  $Y_{lm}(\theta, \phi) = N_{lm} P_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$  نوشته

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،  $U(r)$  و پتانسیل الکتروستاتیکی،  $V(r)$  با رابطه (۱۰) به هم مربوط می‌شوند:

$$U(r) = -eV(r) + \Delta E_I \quad (10)$$

$\Delta E_I$  اختلاف انرژی نواری می‌باشد، برای محاسبه چگالی حامل‌ها از جمع تعداد حالت‌های اشغال شده حامل‌ها و توزیع مکانی حامل‌ها به صورت رابطه (۱۱) استفاده می‌شود.

$$n_e = \sum_a n_a |\psi_e|_a|^2, p_h = \sum_b p_b |\psi_h|_b|^2 \quad (11)$$

که  $a$  و  $b$  تعداد حالت‌های مقید و  $n_a, p_b$  تعداد حامل‌های الکترون و حفره اشغال شده در نوارهای تابع موج مربوطه است که برای محاسبه تعداد حامل‌ها باید بر چگالی حالت‌ها با توزیع فرمی دیراک انتگرال گیری کرد.

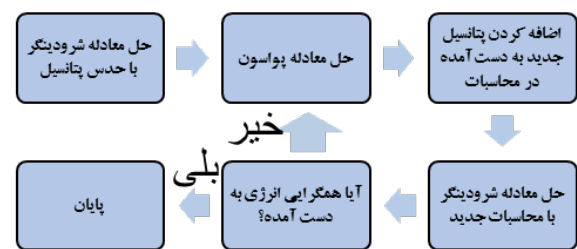
$$n_b = \int_{E_b}^{\infty} f(E) D(E) dE \quad (12)$$

با استفاده از توزیع فرمی دیراک تعداد حامل‌ها به صورت رابطه (۱۳) به دست می‌آید.

$$n_b = \int_{E_b}^{\infty} \frac{D(E)}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)} dE \quad (13)$$

در این رابطه  $T$  دمای انتخابی برای محاسبات خودسازگار  $E_f$  انرژی فرمی و  $E_b$  انرژی تراز زیرلایه که توسط الکترون اشغال شده و  $k_B$  ثابت بولتزمن است. در روش حل معادله خودسازگار پواسون-شرودینگر ابتدا با پتانسیل اولیه 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 می‌شود. سپس قادر به حل معادله پواسون برای به دست آوردن پتانسیل جدید ساختار خواهیم بود. بعد از به دست آوردن پتانسیل و چگالی الکترونی جدید آن‌ها را با مقادیر قبلی مقایسه می‌کنیم و این محاسبات تا زمان همگرایی جواب‌ها تکرار می‌شود. پس از

داخل نانو ساختارها یا ساختارهای نامتجانس باعث به وجود آمدن پتانسیل الکتریکی جدید می‌شود. اثر تبادل و همبستگی ناشی از برهم کنش الکترون - الکترون و برهم کنش الکترون با سایر حامل‌ها در این روش به خوبی لحاظ شده است. این چرخه محاسبه پتانسیل الکتریکی از تغییر توزیع بار و محاسبه مجدد توزیع بار از پتانسیل الکتریکی تا رسیدن به جواب سازگار برای پتانسیل الکتریکی و محاسبات توزیع بار تکرار می‌شود. در واقع با تغییرات به وجود آمده در پتانسیل تغییرات در حالت‌های انرژی و توابع موج مورد بررسی قرار می‌گیرد. در این صورت تابع موج به صورت هم‌زمان جواب معادله شرودینگر و پواسون خواهد بود. الگوریتم حل مسئله به صورت شکل ۱ خواهد بود:



شکل ۱. دیاگرام نشان‌دهنده الگوریتم حل معادله خودسازگار پواسون-شرودینگر

معادله پواسون که بین پتانسیل الکتروستاتیکی ساختار  $V(r)$ ، و تابع توزیع بار  $\rho(r)$ ، ارتباط برقرار می‌کند به صورت رابطه (۸) نوشته می‌شود

$$\nabla \cdot [\epsilon \nabla V(\mathbf{r})] = -\rho(\mathbf{r}) \quad (8)$$

که  $\epsilon$  ثابت گذردهی ماده است. با توجه به تقارن کروی در ساختارها محدودیت پتانسیل کروی متقارن را در نظر می‌گیریم.

چگالی توزیع بار شامل حامل‌های رسانشی آزاد، الکترون‌ها و حفره‌ها و حامل‌های اهداکننده یا پذیرنده یونیزه به صورت رابطه (۹) است.

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_d + \rho_h + \rho_e = -e \left[ (N_a^- - N_d^+) + (p_h - n_e) \right] \quad (9)$$

به روز نرم افزار کامسول انجام شده است. در گام اول به منظور صحنه گذاری نتایج به دست آمده از حل عددی، با حل تحلیلی معادله شرودینگر در یک نقطه کوانتومی، مقایسه می شود. در این مسئله پتانسیل داخل کره کوانتومی برابر صفر و خارج از کره برابر با بی نهایت و شعاع کره کوانتومی برابر ۵ نانومتر در نظر گرفته می شود، با توجه به وجود خطای محاسبه عددی کمتر از یک درصد نسبت به محاسبات نظری، دقت و صحت روش به کاررفته اعتبارسنجی می شود. حل تحلیلی معادله شرودینگر برای یک کره کوانتومی به صورت رابطه شماره (۱۴) است.

$$E_{n,i} = V + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \left( \frac{\alpha_{n,i}}{R} \right)^2 \right] \quad (14)$$

پارامتر  $\alpha_{n,i}$  ریشه  $i$ ام تابع بسل است  $J_n(\alpha_{n,i}) = 0$ . با مقایسه مقادیر به دست آمده از دو روش همگرایی خوبی بین نتایج به دست آمد که نتایج در جدول ۱ نشان داده شده است. اختلاف حاصل شده کمتر از یک صدم درصد است که تأییدی بر صحت و دقت حل عددی معادله می باشد.

جدول ۱. مقایسه جواب های تحلیلی و عددی برای پتانسیل بی نهایت

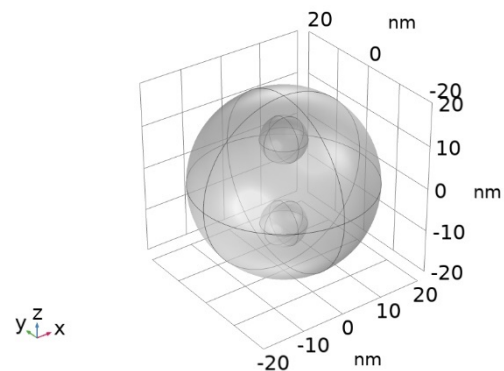
$E_{nl}$	Energy (meV)	
	روش عددی	روش تحلیلی
$E_{10}$	۲۳۷/۹۹۸	۲۳۷/۹۹۸۵
$E_{11}$	۴۸۶/۸۸۰	۴۸۶/۸۸۳۸
$E_{12}$	۸۰۱/۰۰۰	۸۰۱/۰۱۶۹
$E_{20}$	۹۵۱/۹۹۵	۹۵۱/۹۹۶۸

با اطمینان از درستی محاسبات سایر بررسی ها بر ساختار انجام خواهد شد، در ادامه حل معادله شرودینگر با تغییر شعاع دو نقطه کوانتومی کره به صورت یکسان از دو آنگستروم تا نصف شعاع کره کوانتومی، برابر ۱۰ نانومتر بررسی می شود که نتایج ویژه مقادیر حالت پایه و اولین حالت برانگیخته در شکل ۳ نمایش داده شده است.

همگرایی جواب ها تا عدد تعیین شده، تابع موج به صورت هم زمان جواب معادله شرودینگر و پواسون خواهد بود.

### ۳. محاسبات و بررسی نتایج

ساختار مورد مطالعه دو نقطه کوانتومی کره که درون کره کوانتومی به صورت متقارن نسبت به مبدأ و در راستای محور  $Z$  قرار گرفته اند، می باشد. همان طور که در شکل ۲ نشان داده شده است، کره کوانتومی از جنس گالیوم-آرسناید به شعاع  $R = 20 \text{ nm}$  و نقاط کوانتومی کره از جنس ایندیوم آرسناید به شعاع  $R = 5 \text{ nm}$  که به صورت متقارن در مکان های  $Z = -10 \text{ nm}$  و  $Z = +10 \text{ nm}$  قرار گرفته اند.



شکل ۲. ساختار دو نقطه کوانتومی کره متقارن درون یک کره کوانتومی به شعاع  $R = 20 \text{ nm}$

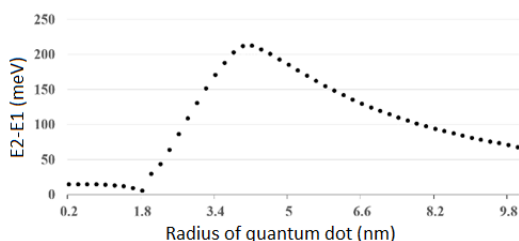
جرم مؤثر و پتانسیل در قسمت های مختلف ساختار متفاوت و به صورت زیر هستند و از پارامترهای مرجع [۳۸] استفاده شده است.

$$v = \begin{cases} v_1 = 0 & \text{in the quantum dots} \\ v_2 = 450 \text{ meV} & \text{in the quantum sphere} \\ v_3 = \infty & \text{out of quantum sphere} \end{cases}$$

$$m = \begin{cases} m_w = 0.04 & \text{in the quantum dots} \\ m_b = 0.0665 & \text{in the quantum spheres} \end{cases}$$

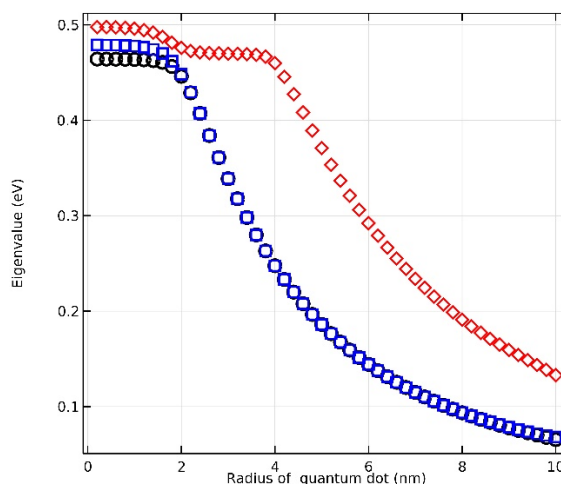
برای حل معادله شرودینگر در ساختار مورد بررسی دو شرط مرزی اعمال می شود که عبارت اند از شرط مرزی بین نقاط کوانتومی کره و کره کوانتومی خارجی که شامل پیوستگی تابع موج و مشتق تابع موج است. همچنین شرط مرزی بین سطوح کره کوانتومی خارجی و فضای بیرون از کره کوانتومی که غیر قابل نفوذ برای آن در نظر گرفته می شود. در این مقاله عمده محاسبات عددی به کمک نسخه

تبهگنی چهارگانه داریم که تبهگنی‌های به وجود آمده به دلیل تقارن ساختار و وجود دو نقطه کوانتومی کروی متقارن، می‌باشد. شکل ۴ اختلاف ویژه مقادیر انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته را نشان می‌دهد.



شکل ۴. اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته نانو ساختار

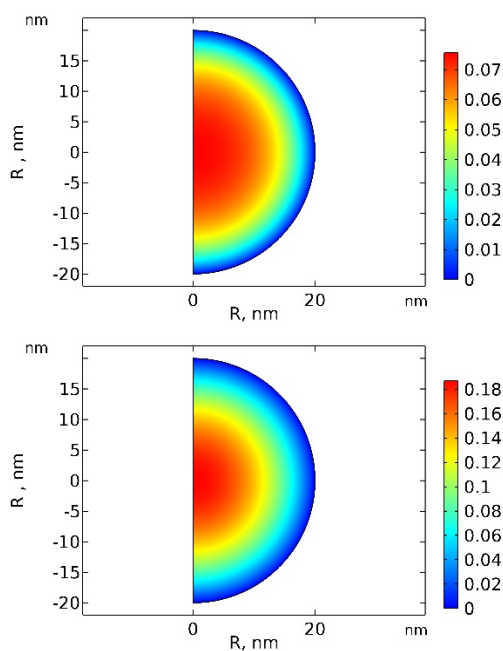
شکل ۴. اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته نانو ساختار در شعاع ۴ نانومتر مقدار اختلاف برابر ۲۱۵ میلی الکترون‌ولت و ماکزیمم مقدار نمودار است که بیشترین اثر نقاط کوانتومی در این شعاع است. در واقع از شعاع ۴ تا ۱۹ نانومتر نقاط کوانتومی، الکترون به‌طور کامل، هم در ویژه حالت پایه و هم در اولین حالت برانگیخته مقید به نقاط کوانتومی می‌شود و همان‌گونه که انتظار داریم در شعاع‌های بیشتر نقاط کوانتومی، ویژه مقادیر و اختلاف آن‌ها کاهش می‌یابد. در شعاع‌های کمتر از دو نانومتر این اختلاف نزدیک به صفر است که دوباره نشان‌دهنده این موضوع است که حامل‌ها بدون احساس نقاط کوانتومی در کره کوانتومی حرکت می‌کنند و در نقطه کوانتومی وجود ندارند و همانند ساختارهای کوانتومی ساده مانند کره کوانتومی یا سیم کوانتومی، اختلاف زیادی بین ویژه مقادیر وجود ندارد، نکته قابل توجه این است که با وجود دو نقطه کوانتومی کروی در ساختار، تغییر قابل توجهی در مقادیر انرژی نسبت به ساختار یک کره کوانتومی در مرکز یک سیم کوانتومی مشاهده نشد [۳۹]. شکل ۵ ویژه توابع حالت پایه و اولین حالت برانگیخته برای کره‌های کوانتومی به شعاع ۰/۲، ۱، ۲، ۳، ۵ و ۱۰ نانومتر نشان داده شده است.



شکل ۳. ویژه مقادیر حالت پایه (دایره مشکی)، اولین (مربع آبی) و دومین (لوزی قرمز) حالت برانگیخته نانو ساختار، بیشتر از شعاع ۲ نانومتر ویژه حالات پایه و اولین حالت برانگیخته برابر می‌شوند و تبه گنی به وجود می‌آید که به همین دلیل بعد از شعاع ۲ نانومتر دایره مشکی مشخص نیست.

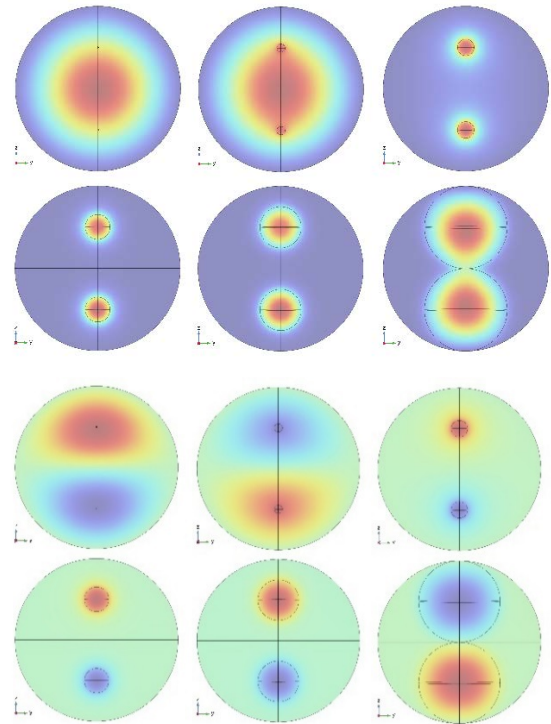
همان‌طور که در شکل ۳ مشاهده می‌شود، در شعاع‌های کمتر از ۲ نانومتر، تغییر قابل توجهی در ویژه مقادیر به‌دست آمده نسبت به حالت کره کوانتومی تنها مشاهده نمی‌شود و بیانگر این موضوع است که حامل‌ها بدون احساس وجود نقاط کوانتومی در کره کوانتومی در حرکت هستند. نتایج مشابه نیز برای مسئله دو نقطه کوانتومی در سیم کوانتومی محاسبه شده است [۳۹]. با افزایش شعاع نقطه‌های کوانتومی کروی، ویژه مقادیر انرژی کمتر می‌شوند تا در نزدیکی شعاع کره کوانتومی بیرونی به کمترین مقدار برسند. همچنین با کاهش شعاع، انرژی تراز پایه (و بقیه ترازها) به سمت  $V_0$ ، پتانسیل کره کوانتومی، میل می‌کند که بیانگر این موضوع است که با کاهش شعاع، الکترون از قید نقطه کوانتومی رها می‌شود و آزادانه در محیط خارج از نقطه کوانتومی و در داخل کره خارجی حرکت می‌کند. با توجه به اینکه شکل تقارن کروی دارد تبهگنی ویژه مقادیر مشاهده می‌شود. در شعاع‌های کمتر از ۲ نانومتر حالت پایه فاقد تبهگنی و اولین حالت برانگیخته تبهگنی سه‌گانه دارد با افزایش شعاع نقاط کوانتومی کروی از شعاع ۲ نانومتر تا ۴ نانومتر، تبهگنی دو گانه در حالت پایه به وجود می‌آید و اولین حالت برانگیخته فاقد تبهگنی می‌باشد، از شعاع ۴ نانومتر علاوه بر تبهگنی دو گانه حالت پایه در اولین حالت برانگیخته

در این بخش خواص الکترونی در ساختار کره کوانتومی با شعاع ۲۰ نانومتر و با آرایش‌های مختلف با ماده دهنده نوع n را مطالعه می‌کنیم، سطوح انرژی الکترون، توابع موج و پتانسیل الکتروستاتیکی ساختار با استفاده از معادلات جفت شده پواسون-شرودینگر به صورت خودسازگار محاسبه می‌شوند. جنس ساختار نیمه‌رسانای گالیوم آرسناید با مقدار ثابت دی‌الکتریک نسبتی ۱۲/۹، دمای ۱۰ درجه کلوین و آرایش  $Nd = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  که به پتانسیل الکتریکی صفر ولت در پوسته متصل شده است. به علت تقارن موجود این مسئله در هندسه دوبعدی با تقارن محوری بررسی می‌شود. ابتدا پتانسیل الکتریکی را از روش معادله توماس فرمی محاسبه کرده، سپس با پتانسیل الکتریکی به دست آمده از حل معادله پواسون-شرودینگر در شکل ۶ مقایسه شده است.



شکل ۶. نمودار پتانسیل الکتریکی در فواصل مختلف از مرکز نقطه، برای یک نانو کره کوانتومی با شعاع ۲۰ نانومتر با استفاده از تقریب پواسون-شرودینگر (شکل پایین) و تقریب توماس فرمی (شکل بالا)

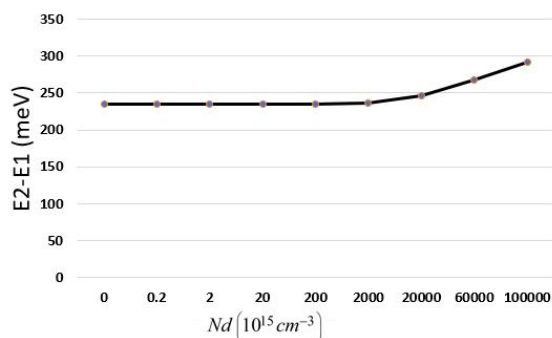
همچنان که ملاحظه می‌شود حل معادله پواسون-شرودینگر به خوبی تغییرات و مقدار پتانسیل در داخل ساختار کوانتومی را نشان می‌دهد. تأثیر میزان آرایش بر خواص ساختار، با تغییر آرایش و محاسبه ویژه مقادیر انرژی، در شکل ۷ نشان داده شده است. همان‌طور که ویژه مقادیر انرژی به دست آمده از حل معادله شرودینگر مستقل از آرایش اعمال شده، در حل



شکل ۵. ویژه توابع حالت پایه (شکل دو ردیف اول) و اولین حالت برانگیخته (شکل دو ردیف دوم) شعاع نقاط کوانتومی کروی به ترتیب از سمت راست 0.2, 1, 2, 3, 5, 10 nm

با توجه به نمودار ویژه توابع در شعاع‌های کمتر از ۰/۵ نانومتر، ویژه توابع طوری رفتار می‌کنند که گویی نقاط کوانتومی کروی در ساختار وجود ندارند و الکترون‌ها در خارج از نقطه کوانتومی و در کره کوانتومی بزرگ قرار دارند، با بزرگ‌تر شدن شعاع کره‌های کوانتومی تا یک نانومتر به آهستگی تأثیر کره‌های کوانتومی مشخص شده و همان‌طور که از نمودار مربوط به کره‌های با شعاع ۱ نانومتر مشخص است، احتمال حضور الکترون در اطراف کره‌ها بیشتر می‌شود. با بزرگ‌تر شدن شعاع نقاط کروی احتمال حضور الکترون‌ها به‌طور کامل در نقاط کوانتومی قرار می‌گیرد و به دلیل اینکه دو کره به صورت متقارن وجود دارند تبهگنی نیز به وجود می‌آید.

با در نظر گرفتن اثر حامل‌های بار درون ساختار از جمله الکترون‌ها یا ناخالصی‌های تزریق‌شده، حل معادله شرودینگر به تنهایی جواب نزدیکی به حالت واقعی نمی‌دهد؛ از این رو با استفاده از معادله خودسازگار پواسون-شرودینگر جواب‌هایی با تقریب دقیق‌تر حاصل می‌شود.



شکل ۹. اختلاف ویژه مقادیر حالت برانگیخته و حالت پایه کره کوانتومی با شعاع ۵ نانومتر برحسب مقادیر مختلف آرایش

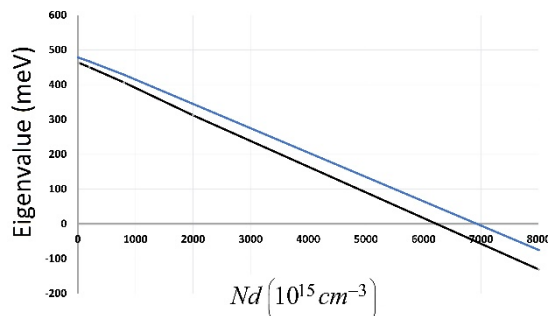
در این ساختار با کوچک کردن شعاع نقطه کوانتومی کروی، یعنی در شعاع ثابت ۵ نانومتر، ویژه مقادیر حالت پایه و اولین حالت برانگیخته افزایش می‌یابد. همان‌طور که در شکل ۹ نشان داده شده است، اختلاف آن‌ها با افزایش مقدار آرایش در محدوده بررسی شده، به میزان ۶۰ میلی‌الکترون‌ولت افزایش می‌یابد. اختلاف انرژی در گستره بین ۲۳۵ تا ۲۹۲ میلی‌الکترون‌ولت با آرایش‌های مختلف است که برای کاربردهای مختلف از جمله کاربردهای نوری یا الکترونی و جذب می‌تواند استفاده شود.

بررسی مشابه برای کره کوانتومی به شعاع ۱۰ نانومتر انجام شد، مشابه ساختار کره کوانتومی ۵ نانومتری با افزایش مقدار آرایش ویژه مقادیر کاهش یافته و اختلاف آن‌ها افزایش می‌یابد، اختلاف انرژی به وجود آمده تحت تأثیر افزایش آرایش برای کره کوانتومی به شعاع ۱۰ نانومتر، بین ۶۰ تا ۱۲۰ میلی‌الکترون‌ولت است.

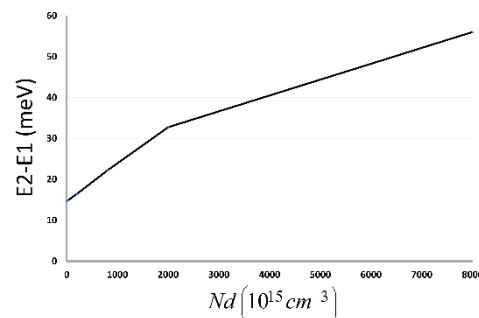
با افزایش شعاع کره کوانتومی آستانه تأثیر میزان آرایش بر خواص الکترونی ساختار کاهش می‌یابد یعنی در کره کوانتومی با شعاع کم در آرایش به مراتب بیشتر تأثیرات آن قابل مشاهده است و در کره کوانتومی با شعاع بیشتر این در میزان آرایش کمتر تغییرات مشاهده می‌شود.

در ادامه، ساختار دو نقطه کوانتومی کروی از جنس ایندیوم آرسناید درون کره کوانتومی از جنس گالیوم آرسناید، در حضور آرایش نوع n با کمک معادله پواسون-شرویدینگر مطالعه می‌شود. دو نقطه کوانتومی با شعاع ۵ نانومتر است که به فاصله ۲۰ نانومتر از هم و درون کره کوانتومی با شعاع ۲۰

معادله پواسون-شرویدینگر هر چه مقدار آرایش کمتر می‌شود ویژه مقادیر حاصل شده به ویژه مقادیر با حل معادله شرویدینگر، شبیه حالت‌هایی که  $Nd=0$  است، نزدیک می‌شود که این موضوع در شکل ۷ قابل مشاهده است.



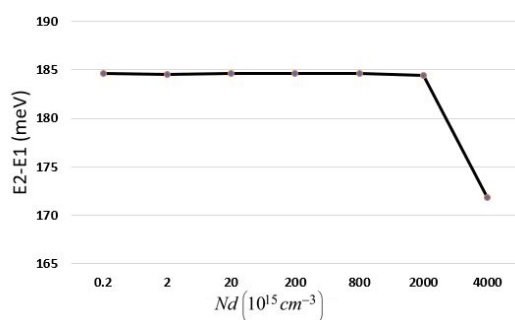
شکل ۷. ویژه مقدار حالت پایه (مشکی) و اولین حالت برانگیخته (آبی) کره کوانتومی با شعاع ۲۰ نانومتر برحسب مقادیر مختلف آرایش



شکل ۸. اختلاف ویژه مقدار حالت برانگیخته و حالت پایه کره کوانتومی با شعاع ۲۰ نانومتر برحسب مقادیر مختلف آرایش

اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته نیز با افزایش مقدار آرایش افزایش می‌یابد، این مطلب در شکل ۸ نشان داده شده است. با توجه به تغییرات نسبتاً زیاد بین حالت انرژی پایه و اولین حالت برانگیخته، این موضوع می‌تواند در جذب امواج الکترومغناطیس با طول موج بلند کاربرد داشته باشد و بر اساس نیاز تنظیم شود. اکنون با کم کردن شعاع نقطه کوانتومی کروی تا ۵ نانومتر، اثر کاهش شعاع را با مقادیر مختلف آرایش بررسی می‌کنیم. در شکل ۹ اختلاف ویژه مقادیر حالت پایه و حالت برانگیخته اول برحسب مقادیر مختلف آرایش برای کره کوانتومی به شعاع ۵ نانومتر رسم شده است.

همان‌طور که در شکل ۱۰ نشان داده شده است، با افزایش غلظت آلایش، ویژه مقادیر انرژی کاهش می‌یابد که مطابق انتظار بوده و در ساختار بررسی شده قبلی نیز همین رفتار نشان داده شده است. اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته با افزایش مقدار آلایش کاهش می‌یابد که در شکل ۱۱ نشان داده شده است. تغییرات انرژی بین حالت انرژی پایه و اولین حالت برانگیخته، در آلایش‌های کم بر روی اندازه ویژه مقادیر انرژی تأثیرگذار است و اختلاف آن‌ها تقریباً ثابت می‌ماند با افزایش بیشتر غلظت آلایش اختلاف ویژه مقادیر حالت پایه و اولین حالت برانگیخته نیز دستخوش تغییر قرار می‌گیرد و در غلظت‌های بالا این اختلاف کاهش می‌یابد. این خصوصیات امکان طراحی‌های مختلف در سیستم‌های الکترونیکی و الکترواپتیکی فراهم می‌کند. در شکل ۱۱ همچنان که مشاهده می‌شود، اختلاف انرژی پایه و اولین حالت برانگیخته مقادیر از ۱۷۲ تا ۱۸۵ میلی‌الکترون‌ولت است. با توجه به اینکه امواج مادون‌قرمز در بازه وسیع بین ۱/۲۴ میلی‌الکترون‌ولت تا ۱/۷ الکترون‌ولت هستند، این سیستم می‌تواند امواج مادون‌قرمز را در بازه ۱۷۲ تا ۱۸۵ میلی‌الکترون‌ولت جذب و نشر کند و در نتیجه به عنوان آشکارساز مادون‌قرمز در این بازه استفاده شود.



شکل ۱۱. اختلاف ویژه مقادیر انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته ساختار دو کره کوانتومی درون کره کوانتومی با تغییرات آلایش

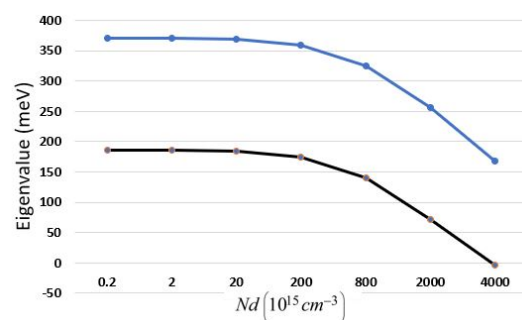
در ادامه ویژه توابع از حل معادله پواسون-شرودینگر در این ساختار بررسی خواهد شد.

قرار دارند، پتانسیل بر روی سطح کره برابر صفر در نظر گرفته می‌شود، در ساختار نقاط کوانتومی کروی بدون آلایش و کره کوانتومی با ماده دهنده نوع n کوانتومی آلایش یافته است. ماده بررسی شده، کره کوانتومی بیرونی خصوصیات گفته شده ماده کره کوانتومی داخلی را دارد. در جدول ۲ ویژه مقادیر حالت پایه و اولین حالت برانگیخته دو نقطه کوانتومی کروی در کره کوانتومی نشان داده شده است. ابتدا تغییرات ویژه مقادیر انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته با تغییر آلایش کره کوانتومی بررسی می‌شود.

جدول ۲. ویژه مقادیر دو نقطه کوانتومی کروی با شعاع ۵ نانومتر درون کره کوانتومی با شعاع ۲۰ نانومتر با مقادیر مختلف آلایش برحسب الکترون‌ولت.

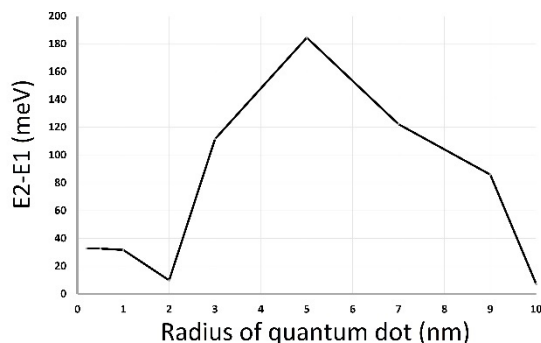
ویژه مقادیر اولین حالت برانگیخته (eV)	ویژه مقادیر حالت پایه (eV)	آلایش انجام شده $Nd (10^{14} \text{ cm}^{-3})$
۰/۱۷۱۷۹	-۰/۰۰۲۹۷	۴۰۰۰۰
۰/۲۵۶۸۱	۰/۰۷۲۳۸	۲۰۰۰۰
۰/۳۲۵۳۸	۰/۱۴۰۷۹	۸۰۰۰
۰/۳۵۹۱۲	۰/۱۷۴۵۰	۲۰۰۰
۰/۳۶۹۱۹	۰/۱۸۴۵۵	۲۰۰
۰/۳۷۰۱۹	۰/۱۸۵۵۶	۲۰
۰/۳۷۰۲۹	۰/۱۸۵۶۶	۲
۰/۳۷۰۳۱	۰/۱۸۵۶۷	بدون ناخالصی

همان‌طور که قابل انتظار است، در ویژه مقادیر به دست آمده از حل معادله پواسون-شرودینگر در ساختار دو نقطه کوانتومی کروی درون کره کوانتومی هر چه میزان آلایش حامل‌ها بیشتر می‌شود، تأثیر آن بر ویژه مقادیر محاسبه شده بیشتر شده و با کم شدن آلایش جواب حاصل از حل معادله به جواب معادله شرودینگر برای ساختار بدون آلایش نزدیک می‌شود.



شکل ۱۰. ویژه مقادیر انرژی حالت پایه (خط مشکی) و اولین حالت برانگیخته (خط آبی) ساختار دو کره کوانتومی درون کره کوانتومی برحسب آلایش‌های مختلف

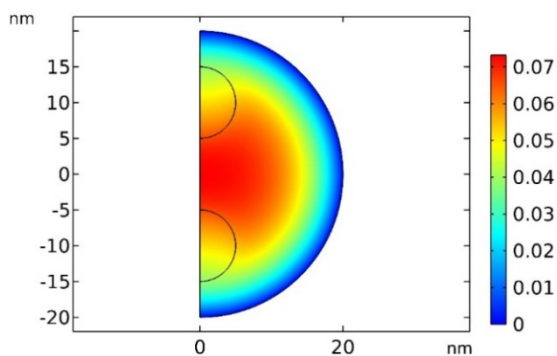
پوشانده است کمترین مقدار خود را دارد و در شعاع پنج نانومتر ماکزیمم است.



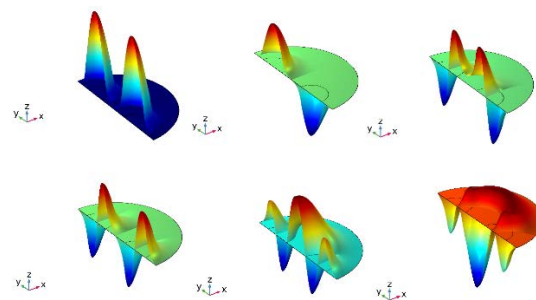
شکل ۱۲. شش ویژه تابع اول ساختار دو نقطه کوانتومی کروی با شعاع ۵ نانومتر درون کره کوانتومی با فاصله ۲۰ نانومتر و آرایش  $Nd = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

این شکل نشان می‌دهد که با افزایش شعاع کره‌های کوانتومی اختلاف ویژه مقادیر انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته مقدار خود یعنی ۱۸۵ میلی‌الکترون‌ولت رسیده؛ سپس این مقدار کاهش می‌یابد که تقریباً رفتاری مشابه ساختار بدون آرایش دارد. مشابه این رفتار در تحقیق اکتاس و همکاران [۴۰] گزارش شده است. با توجه به این شکل بازه اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته بیش از ۱۲۰ میلی‌الکترون‌ولت است که بازه مناسبی برای موارد کاربردی برای آشکارسازی مادون قرمز است.

در شکل ۱۵ پتانسیل الکتریکی ساختار را به روش توماس فرمی و در شکل ۱۶ پتانسیل الکتریکی به روش پواسون-شرودینگر و در شکل ۱۷ مقایسه مقادیر حاصل شده از این دو روش در راستای خط مرکزی کره کوانتومی در یک بعد و در راستای محور Z، نمایش داده شده است.



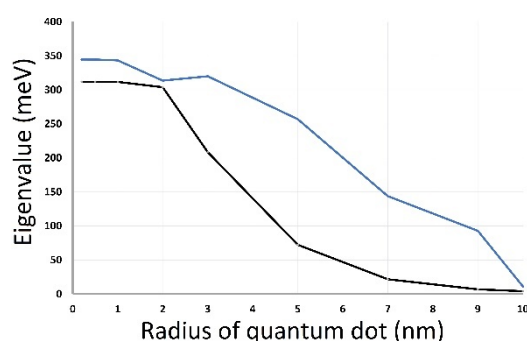
شکل ۱۵. پتانسیل الکتریکی به دست آمده از روش توماس فرمی برای نقاط کوانتومی درون نقاط کوانتومی به شعاع ۵ درون نانوکره به شعاع ۲۰ نانومتر و آرایش  $Nd = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$



شکل ۱۳. ویژه تابع اول ساختار دو نقطه کوانتومی کروی با شعاع ۵ نانومتر درون کره کوانتومی با فاصله ۲۰ نانومتر و آرایش

$$Nd = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

در شکل ۱۲ شش ویژه تابع اول ساختار دو نقطه کوانتومی کروی درون کره کوانتومی با حل معادله پواسون-شرودینگر و آرایش  $Nd = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  نشان داده شده است. در شکل ۱۳ ویژه مقادیر انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته برحسب شعاع کره‌های کوانتومی و آرایش  $Nd = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  نمایش داده شده است.



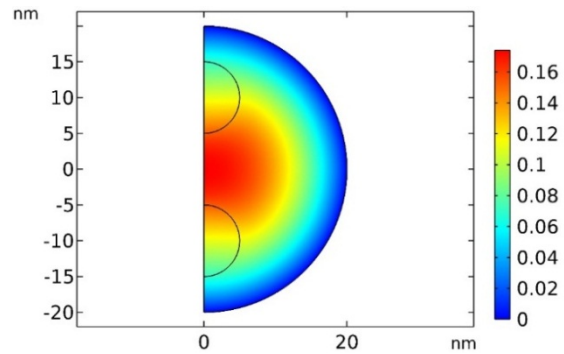
شکل ۱۴. ویژه مقادیر انرژی حالت پایه (خط مشکی) و اولین حالت برانگیخته (خط آبی) با تغییرات شعاع نقاط کوانتومی کروی و آرایش

$$Nd = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

ویژه مقادیر حالت پایه از مقدار ماکزیمم در شعاع‌های کوچک کره کوانتومی شروع می‌شود و با افزایش شعاع کاهش می‌یابد. اختلاف ویژه مقادیر انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته با تغییرات شعاع کره‌های کوانتومی و آرایش  $Nd = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  نمایش داده شده است. در شکل ۱۴ اختلاف ویژه مقادیر انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته با تغییرات شعاع کره‌های کوانتومی و آرایش  $Nd = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  این اختلاف در شعاع دو نانومتر که شروع تأثیر نقاط کوانتومی کروی و شعاع ده نانومتر که نقاط کوانتومی کروی تمام سطح کره را

به صورت متقارن در راستای محور Z قرار گرفته‌اند، بررسی شد. در حالت حدی یعنی زمانی که نقاط کوانتومی کروی بسیار کوچک هستند نتایج با محاسبات کره کوانتومی مقایسه شد که همگرایی مطلوبی به دست آمد و با افزایش شعاع نقاط کوانتومی، توابع موج در درون نقاط کوانتومی قرار گرفت و رفتاری شبیه به حالت دو نقطه کوانتومی درون سیم کوانتومی از خود نشان داد با این تفاوت که تبهگنی بیشتری نسبت به ساختار گفته شده وجود دارد و تبهگنی به علت تقارن بیشتر ساختار مطالعه شده است.

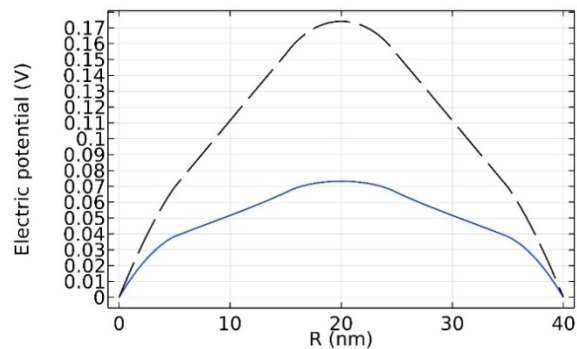
با افزودن ناخالصی یا آلاینده کوانتومی، حل خودسازگار معادلات پواسون-شرودینگر مطالعه و اثر آلاینده در ساختار کره کوانتومی و دونقطه کوانتومی درون کره کوانتومی بررسی شد و توانایی این روش در بررسی ساختارهای آلاینده قابل توجه است. با کاهش مقدار آلاینده ویژه مقادیر به دست آمده برای ساختار مورد بررسی از حل معادلات پواسون-شرودینگر به ویژه مقادیر همان ساختار از روش حل معادله شرودینگر نزدیک شد و با افزایش میزان آلاینده ویژه مقادیر، مقدار قابل توجهی تغییر نموده است. در ساختارهای آلاینده شده که با معادله پواسون-شرودینگر بررسی شد؛ همانند ساختارهای بدون آلاینده، اثر پتانسیل محدودکننده در نانو ساختارها باعث ایجاد کوانتیدگی در ترازهای انرژی می‌شود با افزایش محدودیت در ساختارها، با قرار دادن نانو ساختارهای داخلی یا با کاهش شعاع آن‌ها، انرژی حامل‌ها افزایش پیدا می‌کند. در ساختار کره کوانتومی آلاینده شده در مقایسه با ساختارهای بدون آلاینده با افزایش مقدار آلاینده مقدار انرژی حالت پایه و سایر حالت‌های برانگیخته کاهش پیدا می‌کند و اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته با زیاد شدن آلاینده، افزایش می‌یابد. در ساختار دو نقطه کوانتومی کروی در مرکز کره کوانتومی آلاینده شده در مقایسه با ساختارهای بدون آلاینده با افزایش مقدار آلاینده مقدار انرژی حالت پایه و سایر حالت‌های برانگیخته کاهش پیدا می‌کند و اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته با زیاد شدن آلاینده، کاهش می‌یابد. که این نشان‌دهنده تغییرات انرژی حالت پایه و حالت



شکل ۱۶. پتانسیل الکتریکی به دست آمده از حل معادله

پواسون-شرودینگر برای نقاط کوانتومی به شعاع ۵ درون نانو کره به شعاع

$$N_d = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ و آلاینده } 20 \text{ نانومتر}$$



شکل ۱۷: مقایسه پتانسیل الکتریکی به دست آمده از روش توماس فرمی

(خط آبی پیوسته) و حل معادله پواسون-شرودینگر (خط چین مشکی)

برای نقاط کوانتومی به شعاع ۵ درون نانو کره به شعاع ۲۰ نانومتر و آلاینده

$$N_d = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

در نقاط کوانتومی کروی به علت حضور الکترون‌ها و افزایش غلظت آلاینده، عرض منطقه تخلیه کاهش می‌یابد و این به کاهش تغییرات و عمق پتانسیل الکتروستاتیکی ساختار منجر می‌شود و این تغییرات به نوبه 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. برای ساختار با تقارن متفاوت دیگری، مطالعه خصوصیات الکترونی دو کره کوانتومی جایگزیده در سیم کوانتومی آلاینده با استفاده از حل معادلات شرودینگر و پواسون-شرودینگر توسط فرهمند و همکاران [۴۱] گزارش شده است.

#### ۴. بحث و نتیجه گیری

در این مطالعه خصوصیات الکترونی ساختار کره کوانتومی و دو نقطه کوانتومی کروی جایگزیده در کره کوانتومی که

- well. Optics Communications. 2013; 294: 276-282.
- [10] Gurnick M, DeTemple T. Synthetic nonlinear semiconductors. IEEE Journal of Quantum Electronics. 1983; 19: 791-794.
- [11] Kasapoglu E, Duque C, Sari H, Sökmen I. Intense laser field effects on the linear and nonlinear intersubband optical properties of a semi-parabolic quantum well. The European Physical Journal B. 2011; 82: 13-17.
- [12] Radu A. Laser-dressing of electronic quantum states in graded semiconductor nanostructures. Solid state communications. 2013; 157: 11-15.
- [13] Karimi M, Vafaei H. Second-order nonlinear optical properties in a strained InGaN/AlGaIn quantum well under the intense laser field. Superlattices and Microstructures. 2015; 78: 1-11.
- [14] Zeiri N, Sfina N, Nasrallah S A B, Said M. Intersubband resonant enhancement of the nonlinear optical properties in asymmetric (CdS/ZnSe)/X-BeTe based quantum wells. Optical Materials. 2013; 35: 875-880.
- [15] Keshavarz A, Karimi M. Linear and nonlinear intersubband optical absorption in symmetric double semi-parabolic quantum wells. Physics Letters A. 2010; 374: 2675-2680.
- [16] Rodríguez-Magdaleno K, Martínez-Orozco J, Rodríguez-Vargas I, Mora-Ramos M, Duque C. Asymmetric GaAs n-type double  $\delta$ -doped quantum wells as a source of intersubband-related nonlinear optical response: Effects of an applied electric field. Journal of luminescence. 2014; 147: 77-84.
- [17] Safarpour G, Izadi M, Novzari M, Yazdanpanahi S. Anisotropy effect on the linear and nonlinear optical properties of a laser dressed donor impurity in a GaAs/GaAlAs nanowire superlattice. Superlattices and Microstructures. 2014; 75: 936-947.
- [18] Duque C, Morales A, Mora-Ramos M, Duque C. Exciton-related nonlinear optical response and photoluminescence in dilute nitrogen In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>NyAs<sub>1-y</sub>/GaAs cylindrically shaped quantum dots. Journal of luminescence. 2014; 154: 559-568.
- [19] Safarpour G, Izadi M, Novzari M, Niknam E, Moradi M. 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. 2014; 59: 124-132.
- [20] Al E B, Urgan F, Yesilgul U, Kasapoglu E, Sari H, Sökmen I. Effects of applied electric and magnetic fields on the nonlinear optical properties of asymmetric double inverse parabolic quantum well. Optical Materials. 2015; 47: 1-6.
- [21] Dakhlaoui H. Linear and nonlinear optical absorption coefficients and refractive index changes in GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N double

برانگیخته است و این بازه در حد مقادیر انرژی فوتون‌های مادون قرمز می‌باشد که هم نشر و هم جذب می‌شوند و کاربرد مناسبی در آشکارسازی خواهد داشت.

### سپاسگزاری

نویسندگان بر خود لازم می‌دانند از دانشگاه پیام نور و دانشگاه شیراز، برای همکاری و حمایتشان از این پژوهش، تشکر و قدردانی کنند.

### مراجع

- [1] Harrison P, Valavanis A, Quantum wells. wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures. John Wiley & Sons; 2016.
- [2] Yoffe A. Semiconductor quantum dots and related systems: electronic, optical, luminescence and related properties of low dimensional systems, Advances in Physics. 2001; 50: 1-208.
- [3] Vali M, Dideban D, Moezi N. A scheme for a topological insulator field effect transistor, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2015; 69: 360-363.
- [4] Kuo D M.-T, Fang A, Chang Y. Theoretical modeling of dark current and photo-response for quantum well and quantum dot infrared detectors, Infrared physics & technology. 2001; 42: 433-442.
- [5] Zheng J, Zhang Y, Li L, Tang S, Sh Y, Chen X. An equivalent-stepped-index-coupled DFB semiconductor laser and laser array realized by stepping the duty cycle of the Sampled Bragg grating, Optics & Laser Technology. 2015; 67: 38-43.
- [6] Karabulut I, Mora-Ramos M, Duque C. Nonlinear optical rectification and optical absorption in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As asymmetric double quantum wells: Combined effects of applied electric and magnetic fields and hydrostatic pressure, Journal of Luminescence. 2011; 131: 1502-1509.
- [7] Martínez-Orozco J, Mora-Ramos M, Duque C. Nonlinear optical rectification and second and third harmonic generation in GaAs  $\delta$ -FET systems under hydrostatic pressure, Journal of Luminescence. 2012; 132: 449-456.
- [8] Dakhlaoui H, Almansour S, Algrafy E. Effect of Si  $\delta$ -doped layer position on optical absorption in GaAs quantum well under hydrostatic pressure. Superlattices and Microstructures, 2015; 77: 196-208.
- [9] Niculescu E C, Eseau N, Radu A. Heterointerface effects on the nonlinear optical rectification in a laser-dressed graded quantum

- structures. AIP Conference Proceedings. 2017; 1815: 050017.
- [35] Bouneb I, Kerrou F. Nanometric modelization of gas structure, multidimensional using comsol software. International Journal of Electrical and Computer Engineering. 2018; 8: 2014.
- [36] Gil-Corrales J A, Vinasco J A, Radu A, Restrepo R L, Morales A L, Mora-Ramos M E, Duque C A. Self-consistent schrödinger-poisson study of electronic properties of gaas quantum well wires with various cross-sectional shapes. Nanomaterials. 2021; 11: 1219.
- [37] Jaouane M, Sali A, Fakkahi A, Arraoui R, Urgan F. 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. 2022; 163: 107146.
- [38] Califano M, Harrison P. Presentation and experimental validation of a single-band, constant-potential model for self-assembled InAs/GaAs quantum dots. Physical Review B. 2000; 61: 10959.
- [39] Safarpour G, Barati M, Vahdani M. Electron-hole transition energy for a spherical quantum dot confined in a nano-cylindrical wire, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2011; 44: 728-732.
- [40] Aktas S, Boz F K. The binding energy of hydrogenic impurity in multilayered spherical quantum dot. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2008; 40: 753-758.
- [۴۱] فرمند محمدرضا، مرادی محمود، قرائتی عبدالرسول. مطالعه خصوصیات الکترونی دو کره کوانتومی جایگزیده در سیم کوانتومی آلاییده با استفاده از حل معادلات شرودینگر و پواسون-شرودینگر، دوفصلنامه اپتوالکترونیک. ۱۴۰۲؛ ۵(۲): ۶۱-۷۰.
- quantum wells operating at 1.55  $\mu\text{m}$ . Journal of applied physics. 2015; 117: 135705.
- [22] Khodaverdizadeh M, Asgari A. Enhancing detectivity in mid-infrared photodetectors through structural parameter engineering in HgSe-HgTe colloidal quantum dots. Journal of Nanophotonics. 2024; 18: 016002-016002.
- [23] Liu Z. On the eigenvalue problem of Schrödinger-Poisson system. Proceedings of the American Mathematical Society. 2023; 151: 3059-3068.
- [24] Wang X, Liao F. Existence and Nonexistence of Solutions for Schrödinger-Poisson Problems. The Journal of Geometric Analysis. 2023; 33: 56.
- [25] Pucci P, Wang L, Zhang B. Bifurcation and regularity of entire solutions for the planar nonlinear Schrödinger-Poisson system. Mathematische Annalen. 2023; 1-36.
- [26] Koç F. Stability analysis of exciton, charged excitons, and biexciton in an InP/GaAs/GaSb type-II quantum dot heteronanostructure: a comparison of binding energy and diamagnetic susceptibility. The European Physical Journal Plus. 2023; 138: 1124.
- [27] Batchuluun O, Tsogbadrakh N, Ganbold T. Prediction of Optimal Thickness of InAs/InGaAs Quantum Well, Defect and Diffusion Forum. Trans Tech Publ. 2023; 33-40.
- [28] Moradi M, Moradi M, 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. 2022; 16: 1237-1247.
- [29] Ram-Mohan L, Yoo K, Moussa J. The Schrödinger-Poisson self-consistency in layered quantum semiconductor structures. Journal of applied physics. 2004; 95: 3081-3092.
- [30] Wang L, Wang D, Asbeck P M. A numerical Schrödinger-Poisson solver for radially symmetric nanowire core-shell structures. Solid-state electronics. 2006; 50: 1732-1739.
- [31] Berland K. A general solution to the Schrödinger-Poisson equation for a charged hard wall: Application to potential profile of an AlN/GaN barrier structure. Superlattices and Microstructures. 2011; 50: 411-418.
- [32] Trellakis A, Galick A, Pacelli A, Ravaioli U. Iteration scheme for the solution of the two-dimensional Schrödinger-Poisson equations in quantum structures. Journal of Applied Physics. 1997; 81: 7880-7884.
- [33] Patil D, Talele K, Samuel E, Sonawane U S. Self-consistent analysis of electron transport in GaN/AlGaIn super lattice nanostructure for light emission. Optik. 2016; 127: 7374-7381.
- [34] Uslu S, Yazar Z. Self consistent solution of Schrödinger Poisson equations and some electronic properties of ZnMgO/ZnO hetero

## پی نوشتها

1. chemical vapor deposition
2. molecular beam epitaxy