

Optical Phonon Modes in a Semiconductor Nanostructure

A. Shahbandari Ghouhani¹

Received: 2013.10.4

Accepted: 2014.1.28

Abstract

In the framework of continuum dielectric approximation, the surface optical (SO) phonon modes of a quantum wire of GaAs imbedded in a polar semiconductor $Ga_xAl_{1-x}As$ have been investigated. Two branches of SO phonon modes were derived (SO1, SO2). When the wave vector, ($q_z \rightarrow \infty$), increases, the frequency of each SO modes converged to the frequency of the single planar heterostructure.

Keywords: Quantum nanowire, Phonon modes, Optical phonons, Polar semiconductor;

¹ Lecturer of Farhangiyan University of Iran, Sharkord Bahrololum Pardis, a.shahbandari@yahoo.com

مجله فیزیک کاربردی دانشگاه الزهراء (س)
سال چهارم، شماره ۱، بهار و تابستان ۱۳۹۳

بررسی مدهای فونون‌های اپتیکی در یک نانوساختار نیمه‌رسانا

عباس شاه‌بندی قوچانی^۱

تاریخ دریافت: ۹۲/۷/۱۳

تاریخ تصویب: ۹۲/۱۱/۹

چکیده

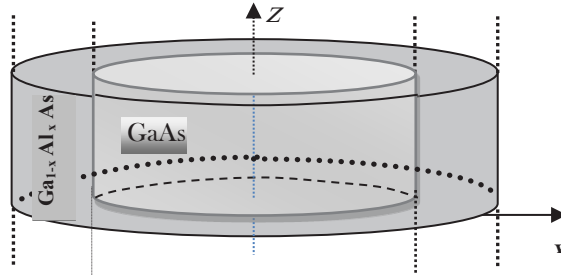
به کمک تقریب دی‌الکتریک پیوسته، مدهای فونون‌های اپتیکی حاصل از فصل مشترک یک سیم کوانتومی استوانه‌ای از جنس $GaAs$ در یک محیط نیمه‌رسانای قطبی $Ga_xAl_{1-x}As$ بررسی شده است. نتایج به دست آمده دو شاخه متفاوت ($SO1$, $SO2$) از مدهای فونونی سطحی را نشان می‌دهند. با افزایش بردار موج ($q \rightarrow \infty$)، بسامد هر یک از مدهای فونونی به بسامد یک ساختار صفحه‌ای تخت نا متجانس همگرا می‌شود.

واژه‌های کلیدی: نانوسیم کوانتومی، مدهای فونونی، فونون‌های اپتیکی، نیمه‌رسانای قطبی.

^۱ مدرس دانشگاه فرهنگیان، پردیس بحر العلوم شهرکرد، a.shahbandari@yahoo.com

۱. مقدمه

پیشرفت‌های سریع در تکنولوژی نانوساختارهای نیمه‌رسانا باعث تولید انواع چاه‌های کوانتومی، سیم‌های کوانتومی و نقاط کوانتومی شده است. لذا این ساختارها توجه بسیاری از محققین را در دهه اخیر به خود جلب کرده است. در سیستم‌های کوانتومی با ابعاد نانو، مدهای جدیدی برای فونون‌های محصور شده به دست می‌آیند. فونون‌های حاصل از سطوح تماس دو نیمه‌رسانا با جنس‌های متفاوت، تأثیر بسزایی بر روی خواص الکترونی و اپتیکی این ساختارها دارد. کاهش ابعاد تا حد نانو نه تنها انرژی حامل‌های بار الکتریکی سیستم، بلکه انرژی فونون‌ها را نیز کوانتیده می‌کند. در این مقاله رابطه کلی برای مدهای فونونی و رابطه پاشندگی فونونی برای یک سیم کوانتومی از جنس GaAs که توسط یک محیط نیمه‌رسانای قطبی $Ga_xAl_{1-x}As$ محصور شده (شکل ۱) به دست آمده است. نتایج بر حسب بردار موج فونونی ارائه شده است.



شکل (۱) ساختار یک سیم کوانتومی از GaAs در یک محیط نیمه‌رسانای قطبی $Ga_xAl_{1-x}As$ محصور شده است.

۲. نظریه

مدهای فونون‌های اپتیکی قطبی در نانو ساختارهای نیمه‌رسانا توسط معادلات الکترو استاتیکی کلاسیکی مشخص می‌شوند.

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho_0(\mathbf{r}), \quad (1)$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}, \quad (2)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \Phi(r) \quad (۳)$$

که در آن $\rho_0(\mathbf{r})$ چگالی بار الکتریکی آزاد است. برای ارتعاشات آزاد $\rho_0(\mathbf{r}) = 0$.
آنگاه

$$\varepsilon(\omega) \nabla^2 \Phi(r) = 0, \quad (۴)$$

که در آن

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{1 - \omega^2 / \omega_{TO}^2}, \quad (۵)$$

در این رابطه ε_0 و ε_∞ متناظر با ثابت دی الکتریک بسامدهای پایین و بالای محیط و ω_{TO} بسامد فونون‌های اپتیکی عرضی است. دو پاسخ معادله (۴) عبارتند از $\varepsilon(\omega) = 0$ مربوط به فونون‌های محصور شده در درون سیم کوانتومی و $\varepsilon(\omega) \neq 0$ ، که مربوط به فونون‌های اپتیکی ناشی از فصل مشترک بین دو محیط (SO) است ($\nabla^2 \Phi(r) = 0$) و برای این فونون‌ها پاسخ مناسب معادله لاپلاس در یک دستگاه مختصات استوانه‌ای، که محور Z را بر محور سیم منطبق کرده ایم به شکل زیر انتخاب می‌شود.

$$\Phi_s^{SO}(r) = A_s \exp(is\varphi) \exp(iq_z z) Q_s(q_z \rho) \quad (۶)$$

که در آن R شعاع سیم کوانتومی است و

$$Q_s(q_z \rho) = \begin{cases} K_s(q_z R) I_s(q_z \rho), & \rho \leq R \\ I_s(q_z R) K_s(q_z \rho), & \rho > R. \end{cases} \quad (۷)$$

در معادله (۷)، $I_m(x)$ و $K_m(x)$ توابع بسل تغییر یافته نوع اول و دوم هستند. برقراری شرط مرزی در $\rho = R$ به معادلات زیر منتهی می‌گردد:

$$\varepsilon_1(\omega_{SO}) \left. \frac{\partial \Phi_s^{SO}}{\partial \rho} \right|_{\rho=R^-} = \varepsilon_2(\omega_{SO}) \left. \frac{\partial \Phi_s^{SO}}{\partial \rho} \right|_{\rho=R^+}, \quad (۸)$$

$$\varepsilon_1(\omega_{SO}) = \varepsilon_1(\infty) \frac{\omega_{LO1}^2 - \omega^2}{\omega_{TO1}^2 - \omega^2}, \quad (۹)$$

$$\varepsilon_2(\omega_{SO}) = \varepsilon_2(\infty) \frac{\omega_{LO2}^2 - \omega^2}{\omega_{TO2}^2 - \omega^2} \quad (۱۰)$$

که در آن ω_{LO} بسامد فونون‌های اپتیکی طولی محیط مربوطه است. پاسخ معادله (۸) رابطه پاشندگی فونونی را به دست می‌دهد.

۳. نتایج

در این قسمت نتایج عددی برای پاشندگی فونونی یک سیم استوانه‌ای با ابعاد نانو از جنس GaAs به دست آمده که در یک محیط نیمه رسانای قطبی $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ قرار گرفته است. در محاسبات خود چگالی آلومینیم را برابر $x=0.3$ در نظر گرفته‌یم. داده‌های مورد نیاز در جدول (۱) آمده است.

جدول ۱

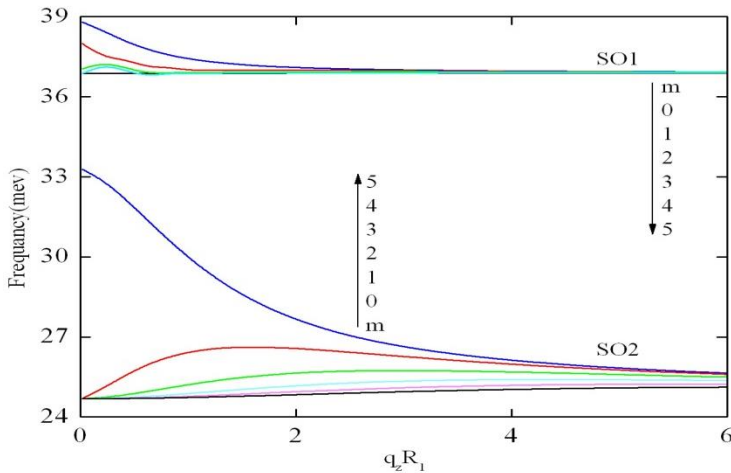
	GaAs	$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$
m_e	0.067	$0.067+0.083x$
$\hbar\omega_{LO}$	6.25	$36.25+3.83x+17.12x^2-5.11x^3$
$\hbar\omega_{TO}$	33.29	$33.29+10.70x+0.03x^2+0.86x^3$
ϵ_0	13.18	$13.18-3.12x$
ϵ_∞	10.89	$10.89-2.73x$

شکل (2) نمودار پاشندگی فونون‌های اپتیکی ($\hbar\omega_{IO}$) را بر حسب بردار موج فونونی q_z (در جهت محور Z) به ازای مقادیر گسسته عدد کوانتومی زاویه‌ای (m) نشان می‌دهد. شعاع سیم کوانتومی را برابر ۱۰ نانو متر در نظر گرفته‌ایم. دو شاخه متفاوت از مدهای سطحی به دست آمده است (SO1, SO2). از نمودار می‌توان نتیجه گرفت که:

- (۱) بسامد فونونی یک تابع گسسته از عدد کوانتومی زاویه سمتی (m) است.
- (۲) وقتی که مقدار بردار موج q_z کوچک است تغییرات فرکانس پاشندگی محسوس است، اما برای مقادیر بزرگ q_z مقدار هر شاخه فونونی به یک مقدار ثابت میل می‌کند.

(۳) برای هر شاخه SO1, SO2 به ازای مقادیر کوچک m (مثلاً برای $m=0,1$) تغییرات بسامدی کاملاً محسوس است و به ازای مقادیر بزرگتر m این تغییرات قابل چشم پوشی است.

(۴) به ازای مقادیر بزرگ بردار موج یا شعاع های بزرگ سیم کوانتومی، بسامد مدهای فونونی به مقدار ثابتی که برابر بسامد ارتعاشی جسم جامد است میل می کند.



شکل (۲): نمودار بسامد پاشندگی برای فونون های اپتیکی حاصل از فصل مشترک بر حسب بردار موج q_z (شعاع سیم کوانتومی ۱۰ نانو متر انتخاب شده است).

۴. نتیجه گیری

در این مقاله یک سیم کوانتومی از جنس گالیوم آرسناید که توسط یک محیط نیمه رسانای قطبی دیگر احاطه شده، در نظر گرفته شده است و رابطه پاشندگی فونونی بر حسب بردار موج q_z به کمک تقریب تابع دی الکتریک پیوسته به دست آمده است. نتایج نشان می دهد که در یک نانو ساختار نیمه رسانای استوانه ای کوانتومی، دو شاخه فونونی متفاوت قابل مشاهده است که با افزایش بردار موج فونونی هر دو شاخه به مقدار ثابتی میل می کنند که متناظر با بسامد فونونی جسم جامد است. همچنین این نتایج نشان می دهند که

تنها به ازای مقادیر کوانتومی کوچک زاویه سمتی m تغییرات بسامد هر دو شاخه قابل توجه است. برای مقادیر بزرگ تغییرات محسوسی در بسامد مدهای فونونی مشاهده نمی‌شود. لذا در محاسبات کوانتومی نیمه رسانای گالیوم آرسناید می‌توان از مقادیر بزرگ ($m > 1$) هنگام مطالعه اثر محصورسازی ابعادی در حد نانو چشم پوشی کرد.

منابع

- [1] H. Panahi and M. Maleki; "Binding Energies of Donor States in GaAs-GaAlAs Quantum Wells Under Hydrostatic Pressure"; *Journal of Applied Sciences* **8** (2008) 636-641.
- [2] Z. P. Wang and X. X. Liang; *Chinese Phys. Lett.* **22** (2005) 2367.
- [3] J. J. Licari and R. Evard; *Phys. Rev. B* **15** (1997) 2254.
- [4] F. Bras, S. Sauvage, P. Boucaud, J. M. Ortega, and J. M. Gerard; *Semicond. Sci. Technol.* **20** (2005) L10-L13.
- [5] H. Hodovanets, S. L. Budko, X. Lin, V. Taufour, M. G. Kim, D. K. Pratt, A. Kreyssig, and P. C. Canfield; *Phys. Rev. B* **88** (2013) 054410.