

Research Paper

Calculation of Energy Levels of Quantum Wires with V-shaped Cross-Section and Variable Width¹

Ali Hossein Mohammad Zaheri²

Received: 2020.02.15

Accepted: 2020.07.27

Abstract

In this work, we have analytically calculated the energy spectrum of electrons and holes of quantum wires with V-shaped cross-sections and variable widths. To modify the wire structure, we have used the equations proposed by Inoshita *et al.* We introduce a new effective potential according to the shape of the cross-section of this nanowire for solving the Schrodinger equation. Using this proposed effective potential and considering a suitable modified coordinate (mapping coordinate) that enables us to separate two-dimensional wave functions into two one-dimensional equations. we have calculated the wave functions and corresponding eigenvalues of the charge carriers in these nanowires. We find that by increasing the curvature of the top of the quantum wire (b) the energy of the charge carriers will be decreased. Our results are in good agreement with previous research. The results of this work are valuable for studying the physical properties of V-shaped nanowires that require analytical computation.

Keywords: *Quantum Wires, V-shaped Nano-Wires, Eigenfunction, Eigenvalue, Effective Potential.*

¹ DOI: 10.22051/jap.2020.30176.1146

² Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Payam-e Noor University, Tehran, Iran. Email: ahmzaheri@pnu.ac.ir.

محاسبه ترازهای انرژی سیم‌های کوانتمی با سطح مقطع V شکل و شیار متغیر^۱

علی حسین محمد ظاهری^۲

تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۱۱/۲۶

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۰۴/۰۷

چکیده

در این کار، طیف انرژی الکترون‌ها و حفره‌های سیم‌های کوانتمی با سطح مقطع V شکل با پهنای شیار متغیر به صورت تحلیلی محاسبه شده است. این پژوهش در ادامه کار اینوشیتا و همکاران او است، که در آن، خواص نانو سیم‌های V شکل با شیار ثابت را مطالعه و بررسی کرده‌اند. برای اصلاح ساختار سیم، از معادلات پیشنهادی در مقاله اینوشیتا و همکاران در خصوص سیم‌های کوانتمی با سطح مقطع V شکل ولی با پهنای شیار متغیر استفاده شده است. یک پتانسیل مؤثر جدید با توجه به شکل سطح مقطع این نانو سیم معرفی کردیم و با استفاده از آن و در نظر گرفتن مختصات تبدیل یافته مناسب، تابع موج دوبعدی شرو دینگر به دو معادله دیفرانسیل یک‌بعدی تبدیل شد. با استفاده از این دو معادله، مقادیر ویژه (ترازهای انرژی) و همچنین توابع موج متناظر با آن‌ها برای حامل‌های بار در نواحی داخلی و بیرونی سیم محاسبه شدند. نتایج با کلیت نتایج تحقیقات قبلی مطابقت خوبی دارند. لازم است ذکر کنیم که به دلیل آنکه

^۱ DOI: 10.22051/jap.2020.30176.1146

^۲ استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران. ahmzaheri@pnu.ac.ir

سیم‌های کوانتومی با این ویژگی برای اولین بار ارزیابی شده است، امکان مقایسه عددی بین نتایج این کار با کارهای دیگران وجود ندارد. ولی با توجه به خصوصیت ذاتی این نوع نانو ساختارها می‌توان گفت که نتایج بسیار خوبی حاصل شده است. از جمله آنکه با افزایش انحنا بالای سیم کوانتومی (در شکل (a-1) با نماد (b)) مقدار ویژه انرژی کاهش می‌یابد که با قواعد کوانتومی سازگاری کامل دارد. نتایج حاصل از این کار برای مطالعه خواص فیزیکی نانو سیم‌های V شکل که نیاز به محاسبات تحلیلی دارند بسیار بارز است.

واژگان کلیدی: سیم‌های کوانتومی، نانو سیم با مقطع V شکل، ویژه تاج، ویژه مقدار، پتانسیل مؤثر.

۱. مقدمه

مطالعه نانو سیم‌ها طی دو دهه گذشته به دلیل کاربرد وسیع آن‌ها در لیزرهای نیمه‌هادی و استفاده در ساخت ابزارهای دقیق نوری به‌طور ویژه‌ای مد توجه محققان حوزه‌های فیزیک و شیمی و مهندسی قرار گرفته است. این گروه از نانو ساختارها در ساخت بسیاری از دستگاه‌های اپتیکی و الکترونیکی استفاده شده‌اند و طی چند سال گذشته پیشرفت بسیار خوبی کرده‌اند. محققان برای دستیابی به کاربردهای فنی و پیش‌بینی پدیده‌های فیزیکی جدید، تأثیر اندازه ابعاد کوانتومی را در نانو ساختارها با روش‌های نظری و تجربی مطالعه کرده‌اند. همچنین، دانشمندان با استفاده از تکنیک‌های جدید رشد بلور امکان تهیه سیم‌های کوانتومی با سطوح مقطع مختلف فراهم کرده‌اند. محققان کاربردهایی از این نانو ساختارها را در حوزه‌های میکرو و نانو الکترونیک پیدا کرده‌اند که انتظار می‌رود برخی از آن‌ها در آینده نزدیک تأثیر اقتصادی چشمگیری در این حوزه‌ها داشته باشد. علاوه بر این، در دهه اخیر علاقه زیادی به خصوصیات الکترونی و نوری سیم‌های کوانتومی ابراز شده است.

با توجه به شکل پیچیده سطح مقطع این سازه‌ها، محاسبه تراز انرژی و در نتیجه تمام خصوصیات الکترونی و نوری به نظر می‌رسد کار بسیار مشکلی باشد و نیاز به تلاش‌های نظری فراوانی دارد. این عدم شناخت از سیم‌های کوانتومی، به ویژه سیم‌های کوانتومی با عرض متغیر انگیزه اصلی مطالعه ویژگی‌های ساختاری این نوع سیم‌های کوانتومی است. سیم‌های کوانتومی با سطح مقطع V شکل با مواد مختلفی از قبیل $[1-3]$ InGaAs/GaAs، $[4]$ InGaAs/AlGaAs، $[5]$ InGaAs/InP، $[6]$ InAlAs/InP، $[7-9]$ GaAs/AlGaAs و $[10]$ Si/SiO₂ ساخته شده‌اند. بسیاری از محققان رویکردهای نظری مختلفی را برای محاسبه سطح انرژی و توابع موج متناظر

سیم‌های کوانتومی انجام داده‌اند. البته، روش‌های محاسباتی عددی متعددی از قبیل بستگی قوی [۵]، تابع پوشا و المان‌های محدود استفاده شده و مقادیر نتایج متعددی جهت اینگونه سیستم‌ها به دست آمده است. همچنین، آمان و همکاران، پستلی و همکاران، سارا و همکاران، گلدونی و همکاران و روسی و مولیناری [۱۱-۱۵] روش‌های متعددی را توسعه دادند که در آن‌ها بسته موج بر اساس مشخصات فیزیکی سیم‌های کوانتومی V شکل بسط داده شده است.

همانطور که در بالا ذکر شد اینوشیتا و ساکاکا [۱] ساختار الکترونی یک سیم کوانتومی V شکل با عرض ثابت را محاسبه کرده‌اند. برای این منظور، آن‌ها پتانسیل محدود شده را با یک رابطه تحلیلی تقریبی مدل کرده و برای انجام محاسبات از روش دستگاه مختصات تبدیل یافته (نگاشته) استفاده کرده‌اند. در دستگاه مختصات جدید شکل سطح مقطع از شکل V به خطوط تخت تبدیل می‌شود. آن‌ها مجموعه‌ای از معادلات را برای ادامه محاسبات خود توسط محققان دیگر پیشنهاد کرده‌اند، که به عنوان معادلات پایه در این پژوهش استفاده کرده‌ایم. علاوه بر این، در کار حاضر یک طرح پتانسیل مؤثر اما ساده ارائه شده است که با اعمال آن و استفاده از تقریب جرم مؤثر، ویژه توابع و ویژه مقادیر متناظر با آن‌ها را برای الکترون‌ها و حفره‌ها در این نوع نانوسیم‌ها می‌توان محاسبه کرد.

۲. مبنای نظری

برای محاسبه ویژه توابع و ویژه مقادیر حامل‌های بار در سیم‌های کوانتومی، معادله شرودینگر دوبعدی با در نظر گرفتن تقریب جرم مؤثر برای یک الکترون (حفره) حل شده است. در جامدات، یک الکترون با پتانسیل دوره‌ای از شبکه، الکترون‌های دیگر و نیز با فونون‌ها تعامل دارد. به دلیل این فعل و انفعالات، جرم الکترون متغیر می‌شود. بنابراین، در استفاده از معادلات معمول الکترو دینامیک برای حامل‌های بار، باید از مقادیر تغییر یافته جرم ذره استفاده کنیم که به آن جرم مؤثر گفته می‌شود. در واقع، جرم مؤثر نیمه هادی با برآزش دادن نمودار واقعی $E-K$ در حدود کمینه نوار رسانش یا حداکثر نوار ظرفیت با نمودار سهمی به دست می‌آید که این برآزش دادن بیانگر تقریب مذکور است.

با فرض آن که در دستگاه مختصات، جهت حرکت آزادانه حامل‌های بار (الکترون یا حفره) در امتداد محور Z باشد، آنگاه تابع موج برای الکترون‌های رسانش (حفره‌ها) در نوار ظرفیت یک سیم کوانتومی به صورت $e^{ikz}\psi(x, y)$ است. همچنین فرض می‌کنیم، ثابت دیراک و جرم الکترون در حالت ایستایی برابر واحد باشد. بنابراین، معادله شرودینگر در دو بعد به صورت زیر است،

۷۰ / محاسبه ترازهای انرژی سیم‌های کوانتومی با سطح مقطع V شکل و شیار متغیر

$$-\frac{1}{2m^*} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right] + V(x, y) \psi = E \psi \quad (1)$$

در این رابط، m^* جرم مؤثر الکترون یا حفره و $V(x, y)$ سد پتانسیل را در سیم کوانتومی نشان می‌دهد. با توجه به آن که به طور خاص در سیم‌های کوانتومی V شکل، گسترش کانال در بالای خط الرأس سبب ایجاد محدودیت قوی‌تر حامل بار می‌شود و از نظر کاربردی مهم است، در این کار از دستگاه معادلات زیر استفاده می‌کنیم که توسط اینوشیتا و همکاران برای بهبود و پیشرفت کارهای قبلی [۱] پیشنهاد شده است. به عبارت ساده‌تر برای توصیف هندسی سیم کوانتومی V شکل از توابع پیشنهادی توسط یونیشیتا و ساکاکاکی که در ذیل آمده‌اند استفاده می‌کنیم،

$$\begin{cases} y_1(x) = -\sqrt{2} b \ln[\cosh(x/b)] + L/2 \\ y_2(x) = y_1(x) - [1 + c \exp(-x^2/d^2)]L \end{cases} \quad (2)$$

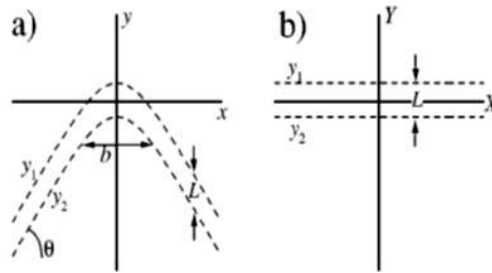
در رابطه (۲)، $y_1(x)$ و $y_2(x)$ معادلات مربوط به فصول مشترک (وجه‌های) بالا و پایین هستند. همچنین، L عرض کانال در مرکز مختصات تبدیل یافته ($X=0$) را نشان می‌دهد که در چند سطر بعدی تعریف خواهد شد. b عرض خم در بالای سیم کوانتومی را نشان می‌دهد که برای b های کوچک‌تر سیم نوک تیزتر به نظر می‌رسد. در رابطه فوق مقدار جذر دو به ساختار سیم در این مسئله خاص وابسته است، که در حالت کلی به جای عامل $\sqrt{2}$ ، $\tan \theta$ قرار داده می‌شود. در حالت کلی، زاویه $180 - 2\theta$ همان زاویه بین صفحات مرزی است (شکل 1-a). همچنین، c و d ضرایب ساختاری سیم می‌باشند. این کمیات در شکل (۱) نمایانند. با جایگذاری این مقادیر در معادله (۲) خواهیم داشت:

$$\begin{cases} y_1(x) = -b \tan \theta [\log[\cosh(x/b)]] \\ y_2(x) = -[1 + c \exp(-x^2/d^2)]L - b \tan \theta [\log(\cosh(x/b))] \end{cases} \quad (3)$$

معادلات (۲) و (۳) را در دستگاه مختصات $X - Y$ نوشته‌ایم. می‌توان این معادلات را با یک انتقال به دستگاه مختصات $X - Y$ تبدیل کرد (نگاشت) که حاصل این نگاشت معادلات زیر است [۲ و ۱]:

$$\begin{cases} X = x \\ Y = -y - [1 + c \exp(-x^2/d^2)]L - b \tan \theta \log(\cosh(x/b)) \end{cases} \quad (4)$$

در مختصات جدید، (شکل 1-b) برای $Y=y_1$ (صفحه زیرین) نتیجه $Y=-L/2$ خواهد بود که یک خط مستقیم به موازات محور X را نشان می‌دهد. اما، برای $Y=y_2$ (وجه فوقانی) نتیجه یک تابع نمایی است که نتیجه مطلوبی نیست. بنابراین، برای رفع این مشکل، قسمت نمایی معادله (۴) را بسط دادیم و با یک تقریب خوب فقط اولین جمله بسط را در محاسبات به کار بردیم، که در نتیجه، مختصات تبدیل شده مسطح شد. لازم است ذکر کنیم که، فقط در این مرحله از این تقریب استفاده شده و در قسمت‌های دیگر اعمال نشده است.



شکل ۱ در این شکل مقطع سیم کوتاهی در دستگاه مختصات عادی (a) و تبدیل یافته (نگاشته) (b) نشان داده شده است.

برای حل معادله شرودینگر در مختصات جدید (Y-X) (شکل ۱-b) باید معادله دیفرانسیل جزئی تابع موج را از مختصات x-y، به مختصات جدید (X-Y) یعنی $(\frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2})$ تغییر دهیم. توجه کنید که دستگاه مختصات جدید (X-Y) متعامد نیست و عملگر لاپلاسی (∇^2) با استفاده از روش تانسورها محاسبه شدنی است [۱۶]. با قرار دادن نتیجه لاپلاسی تبدیل یافته در معادله شرودینگر، معادله جدید به دست می آید. به عبارت ساده، معادله (۱) که در دستگاه X-Y نوشته شده است با توجه به معادله (۴) و استفاده از آنالیز تانسوری به معادله زیر در دستگاه X-Y تبدیل می شود [۳]:

$$-\frac{1}{2m^*} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Y^2} \right] + \frac{1}{2m^*} \left[\frac{\left[\frac{(-\frac{2cL}{d^2}) \exp(-x^2/d^2) \left[1 - \left(\frac{2}{d^2}\right) X^2 \right] + \frac{\tan \theta}{b \cosh^2(X/b)} \right]}{\left(\frac{2cL}{d^2}\right) X \exp(-x^2/d^2) - \tan \theta \tanh(X/b)} \right] \left(\frac{\partial \psi}{\partial Y} \right) - \left[\left(\frac{\partial}{\partial X} \right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial Y} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial Y} \right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial X} \right) \right] - \left[\left(\frac{2cL}{d^2} \right) X \exp(-x^2/d^2) - \tan \theta \tanh(X/b) \right] \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial Y^2} \right) \right] + V(Y)\psi = E\psi \quad (5)$$

مقدار $V(Y)$ در معادله (۵) به صورت زیر است،

$$V(Y) = \begin{cases} 0 & \text{for } |Y| < L/2 \\ V_b & \text{for } |Y| > L/2 \end{cases} \quad (6)$$

همانطور که در معادله (۵) می بینید، معادله شرودینگر نگاشته به طور چشمگیری پیچیده تر می شود زیرا اکنون همه اطلاعات مربوط به محدودیت های جانبی را شامل می شود. برای رفع این پیچیدگی مشابه مقاله کرسی و وبر [۱۷] می توان چند جمله ای درون کروه دوم را در معادله (۵) با ضریب $\frac{1}{2m^*}$ نامید. در واقع، در پایان جداسازی معادله شرودینگر تمام جملات مختلط این معادله را با یک پتانسیل مؤثر تعویض می کنیم [۱۷]. بنابراین، معادله شرودینگر به صورت زیر در می آید،

$$-\frac{1}{2m^*} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Y^2} \right] + [V(X) + V(Y)]\psi = E\psi \quad (7)$$

در واقع معادله فوق، معادله شرودینگر در دستگاه X - Y است.

بنابراین در این بخش یک معادله شرودینگر داریم که پتانسیل در آن به صورت دو جمله جدا بر حسب X و Y و $V(Y)$ همان پتانسیل معادله (۶) است. برای حل معادله (۷)، $V(X)$ را نیز باید تعریف کرد. برای این منظور، یک پتانسیل مؤثر در راستای X برای سیم کوانتمی V شکل با پهنای شیار متغیر، در بخش بعد ارائه می‌دهیم.

۳. پتانسیل مؤثر

پتانسیل باید شامل برخی خصوصیات باشد از قبیل: قادر به جایگزین شدن با جمله جدایی‌ناپذیر در معادله (۵) به منظور جداسازی متغیرهای X و Y ، ثابت بودن، در برداشتن تأثیر محدودیت نانوسیم در خواص فیزیکی آن در امتداد محور X ها. در این کار، با در نظر گرفتن ویژگی‌های فوق و وجود جمله‌نمایی در معادله (۵) و نیز با توجه به معادله (۷)، پتانسیل گاوس و مورس $[V]$ یک پتانسیل مؤثر در راستای X برای سیم کوانتمی V شکل با پهنای شیار متغیر به شکل زیر پیشنهاد می‌شود،

$$V(X) = -Ae^{-\alpha X^2} + B \quad (8)$$

که در آن، A و B پارامترهای ثابت و وابسته به شکل و ابعاد این نانوسیم است که برای محاسبه آنها از شرایط مرزی زیر استفاده می‌کنیم،

$$V(X) = \begin{cases} 0 & \text{if } X = 0 \\ V_0 = V_X \tan \theta & \text{if } X = b \end{cases} \quad (9)$$

با اعمال شرایط مرزی پتانسیل مؤثر به شکل زیر خواهد بود،

$$V(X) = \frac{V_X \tan \theta}{1 - e^{-\alpha b^2}} (1 - e^{-\alpha X^2}) \quad (10)$$

با توجه به معادلات (۵) و (۸)، در معادله بالا ضریب α برابر $1/d^2$ محاسبه شد. همچنین، با مقایسه تابع توزیع گاوس $(F(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{X^2}{2\sigma^2}})$ با معادله (۱۰) می‌توان گفت $d^2 \propto b^2$ که ضریب تبدیل تناسب به تساوی به ساختار نانوسیم بستگی دارد. در کار فعلی، این رابطه به صورت $d^2 = 0.36125b^2$ است. درخور ذکر است که این پتانسیل تقریباً مشابه پتانسیل سهموی استفاده شده در کار سارا و همکاران [۱۳] و پتانسیل مورس [۱۸] است. بنابراین، پتانسیل مؤثر کاملاً شناخته شده محسوب می‌شود و با قرار دادن آن در معادله شرودینگر و حل آن، ویژه‌توابع و ویژه‌مقادیر متناظر با آن به دست می‌آید.

۴. نتایج و بحث

الف. تابع موج

با قرار دادن پتانسیل مؤثر در معادله شرودینگر و جدا کردن متغیر X ، معادله یک بعدی شرودینگر به شکل زیر به دست می آید،

$$-\frac{1}{2m^*} \frac{d^2\varphi(X)}{dX^2} + V(X)\varphi(X) = E_X\varphi(X) \quad (11)$$

در این معادله، تابع $\varphi(X)$ که بخشی از معادله $[\psi(X, Y) = \varphi(X)\varphi(Y)]$ است، ویژه تابع و E_X ویژه مقدار متناظر با آن است.

پتانسیل پیشنهادی را در معادله فوق قرار می دهیم:

$$-\frac{1}{2m^*} \frac{d^2\varphi(X)}{dX^2} + \left[\frac{V_X \tan \theta}{1 - e^{-(b^2/d^2)}} (1 - e^{-(X^2/d^2)}) \right] \varphi(X) = E_X\varphi(X) \quad (12)$$

پس از بسط قسمت نمایی در معادله پتانسیل مؤثر و انتخاب دو جمله اول بسط حاصل، خواهیم داشت

$$\frac{d^2\varphi(X)}{dX^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2} \left[\frac{(V_X \tan \theta)}{d^2(1 - e^{-(b^2/d^2)})} X^2 + E_X \right] \varphi(X) = 0 \quad (13)$$

برای ساده تر شدن معادله (۱۱)، دو ثابت $\lambda = \frac{2m^*E_X}{a^2\hbar^2}$ و $a = \left[\frac{2m^*V_X \tan \theta}{d^2\hbar^2(1 - e^{-(b^2/d^2)})} \right]^{1/4}$ و متغیر $\beta = aX$ را معرفی می کنیم، بنابراین، با تبدیل مشتق ها از متغیر X به β و انجام عملیات جبری خواهیم داشت

$$\frac{d^2\varphi(\beta)}{d\beta^2} + [\lambda - \beta^2] \varphi(\beta) = 0 \quad (14)$$

معادله فوق نوسانات هماهنگ را توضیح می دهد که $\varphi_n(\beta)$ توسط رابطه زیر تعریف می شود [۱۶]

$$\varphi_n(\beta) = 2^{-n/2} \pi^{-1/4} (n!)^{-1/2} H_n(\beta) \exp(-\beta^2/2) \quad (15)$$

در این معادله، H_n چندجمله ای هرمیت است. با معکوس کردن β ($X = \beta/a$)، معادله (۱۳) به معادله ذیل تبدیل می شود

$$\varphi_n(X) = (2)^{-n/2} (\pi)^{-1/4} (n!)^{-1/2} H_n(X) \exp(-a^2 X^2/2) \quad (16)$$

معادله (۱۶) بیانگر ویژه تابع (تابع موج) الکترون های (حفره های) سیم کوانتمی در امتداد محور X است.

ب. ویژه مقدار

با قرار دادن معادله (۱۶) در معادله یک بعدی شرودینگر (۱۱)، ویژه مقدار متناظر با این ویژه تابع به شکل زیر به دست می آید،

$$E_{nX} = -\frac{1}{2m^*H_n(X)} [(a^4 X^2 - a^2)H_n(X) + (-2a^2X)H_n'(X) + H_n''(X)] + V(X) \quad (17)$$

در این معادله، $H_n'(X)$ و $H_n''(X)$ به ترتیب مشتقات اول و دوم چندجمله‌های هرمیت هستند. برای به دست آوردن توابع موج و مقادیر ویژه متناظر آن‌ها در امتداد محور Y ، باید یک پتانسیل مؤثر جهت جایگذاری در معادله شرودینگر تعریف کنیم. با در نظر گرفتن شکل سیم کوانتمی در دستگاه مختصات تبدیل شده (نگاشته) $(X-Y)$ ، پتانسیل همان حالت سد پتانسیل ساده است که به صورت زیر تعریف می‌شود

$$V(Y) = \begin{cases} 0 & \text{if } |Y| < L/2 \\ V_b & \text{if } |Y| > L/2 \end{cases} \quad (18)$$

با قرار دادن این پتانسیل مؤثر در معادله شرودینگر در جهت Y ، توابع موج و مقادیر ویژه متناظر با آن به شکل زیر حاصل می‌شود،

$$\varphi_n(Y) = \cos\left(\frac{2n\pi}{L}Y\right) \quad (19)$$

و

$$E_{nY} = \frac{2n^2\pi^2}{m^*L^2} \quad (20)$$

با در نظر گرفتن $\psi_n(X, Y) = \varphi_n(X)\varphi_n(Y)$ و $E_n = E_{nX} + E_{nY}$ تابع موج اصلی و مقادیر ویژه با معادلات زیر توصیف می‌شود،

$$\begin{aligned} \psi_n(X, Y) &= \varphi_n(X)\varphi_n(Y) \\ &= (2)^{-n/2}(\pi)^{-1/4}(n!)^{-1/2}H_n(X)\exp(-a^2 X^2/2) \cos\left(\frac{2n\pi}{L}Y\right) \end{aligned} \quad (21)$$

و

$$E_n = -\frac{1}{2m^*H_n(X)} [(a^4 X^2 - a^2)H_n(X) + (-2a^2X)H_n'(X) + H_n''(X)] + V(X) + \frac{2n^2\pi^2}{m^*L^2} \quad (22)$$

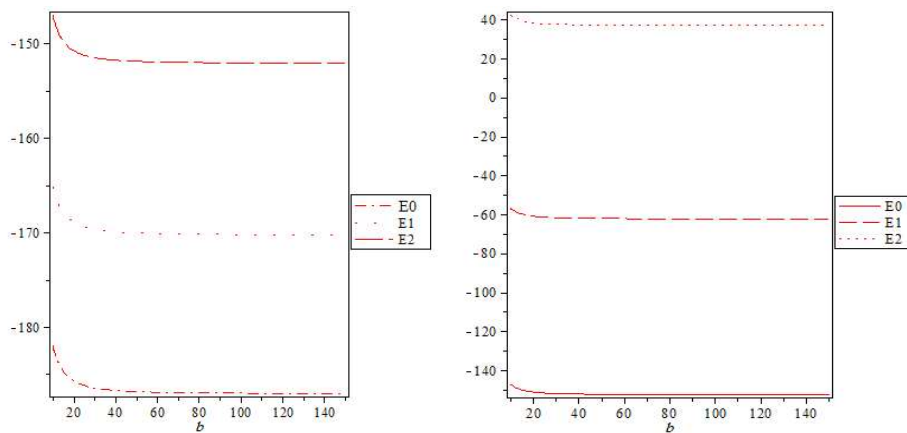
معادلات فوق برای سیم‌های کوانتمی با سطح مقطع V شکل به کار می‌روند. با محاسبه مقادیر $H_n'(X)$ و $H_n''(X)$ برای ترازهای حالت پایه ($n=0$) و برانگیختگی‌های اول و دوم ($n=1, 2$) و قراردادن آن‌ها در معادله (۱۷) ویژه مقادیر متناظر آن‌ها یعنی E_{0X} ، E_{1X} ، E_{2X} به دست می‌آیند که نتایج در ذیل آمده است،

$$E_{0X} = \frac{(V_X \tan \theta)}{(1 - e^{-(b^2/d^2)})} \left[-\frac{X^2}{\hbar^2} - (e^{-(X^2/d^2)}) - (2m^*\hbar^2)^{-1/2} \left(\frac{(V_X \tan \theta)}{(1 - e^{-(b^2/d^2)})} \right)^{-1/2} + 1 \right] \quad (23)$$

$$E_{1X} = \frac{(V_X \tan \theta)}{(1 - e^{-(b^2/d^2)})} \left[-\frac{X^2}{\hbar^2} - (e^{-(X^2/d^2)}) - 3(2m^* \hbar^2)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{(V_X \tan \theta)}{(1 - e^{-(b^2/d^2)})} \right)^{-\frac{1}{2}} + 1 \right] \quad (24)$$

$$E_{2X} = \frac{(V_X \tan \theta)}{(1 - e^{-(b^2/d^2)})} \left[-\frac{X^2}{\hbar^2} - (e^{-(X^2/d^2)}) - 5(2m^* \hbar^2)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{(V_X \tan \theta)}{(1 - e^{-(b^2/d^2)})} \right)^{-\frac{1}{2}} + 1 \right] \quad (25)$$

معادلات فوق برای هر ساختار از سیم کوانتومی با مقطع V شکل کاربرد دارد. در پژوهش حاضر، این روابط برای سیم‌های کوانتومی V شکل که از ترکیب (GaAsAl (GaAs / Al_{0.3}Ga_{0.7}As ساخته شده است به کار می‌رود. برای این منظور مقادیر برخی کمیات مانند جرم مؤثر (* m) و ارتفاع سد پتانسیل (Vb) و نیز ضریب سد پتانسیل (VX) برای الکترون $m^*=0.067m_0$ و $VX=42.4\text{meV}$ و $Vb=225\text{meV}$ استفاده شده است. این کمیت‌ها برای حفره مقادیر $m^*=0.456m_0$ و $VX=10.6\text{meV}$ و $Vb=131\text{meV}$ است. این مقادیر مستقیماً از کار جرالدو و همکاران گرفته شده است [۱۷]. از زاویه $\theta = 54.75^\circ$ استفاده کرده‌ایم به طوری که $2\theta - 1800$ با زاویه اندازه‌گیری شده بین دو وجه خط الرأس مطابقت دارد. نمودار مقادیر ویژه بر حسب مقادیر b در شکل ۲الف برای الکترون و ۲ب برای حفره‌ها با استفاده از مقادیر $L = 8\text{nm}$ و $X = 12\text{nm}$ و $\theta = 54.75^\circ$ برای سه حالت، زمینه (E0) و دو حالت برانگیخته اول (E1) و دوم (E2) با استفاده از نرم‌افزار متلب (Math.-Lab.) رسم شده است.



شکل ۲ب

شکل ۲الف

شکل ۲ تغییر مقادیر ویژه انرژی ویژه بر حسب b در سه حالت، (الف) برای الکترون‌ها و (ب) برای حفره‌ها.

در این نمودارها دیده می‌شود که ویژه‌مقادیر انرژی با تغییر b (فقط برای b های کوچک) متغیر است. این تغییر برای $b > 40$ نانومتر از بین می‌رود. با مقایسه نمودارهای ۲-الف و ۲-ب مشخص است که شیب منحنی حفره‌ها سریع‌تر از شیب منحنی الکترون‌هاست. این بدان معنی است که، تغییر مقادیر ویژه انرژی با b به طور مستقیم به جرم حامل‌های بار بستگی دارد.

۵. نتیجه‌گیری

در این تحقیق، با اعمال معادلات پیشنهادی توسط اینوشیتا و همکاران در معادله شرودینگر به معادله دیفرانسیل دوبعدی بغرنجی رسیدیم که با استفاده از مبحث نگاشت جداسازی شد. همچنین، با تبدیل معادله شرودینگر دوبعدی به دو معادله یک‌بعدی و اعمال پتانسیل پیشنهادی در این کار و حل این معادلات برای نانو ساختارها با سطح مقطع V شکل و عرض متغیر، معادلات ویژه توابع و ویژه مقدار متناظر با آن‌ها محاسبه شد. این معادلات برای سیم‌های کوانتومی با سطح مقطع V شکل صدق می‌کند. برای نمونه، این معادلات برای حالت خاص ذکر شده در بخش قبلی حل شده است و نتایج با استفاده از نرم‌افزار متلب در شکل‌های ۲-الف و ۲-ب آورده شده است. این نتایج با قواعد و پیش‌بینی‌های کوانتومی کاملاً سازگار است.

۶. منابع

- [1] Inoshita T. and Sakaki H. Electronic structure of the ridge quantum wire based on an analytic confinement model, J. App. Phys. 79 269 1996.
- [2] Sadeghi E. and Khordad R. Analytical solution for V-groove quantum wire with an effective potential scheme, Phys. Stat. Sol. B 1, 2005.
- [3] Cingolani R., Sogava F., Arakawa Y., Rinaldi R., Devittorio M., Passaseo A., Taurino A., Catalano M., and Vasaneli L., Micro photoluminescence spectroscopy of vertically stacked $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum wires, Phys. Rev B 58 1962, 1998.
- [4] Martinel E., Reinhardt F., Gustafsson A., Biasiol G., and Kapon E. Self-ordering and confinement in strained $\text{InGaAs}/\text{AlGaAs}$ V-groove quantum wires grown by low-pressure organometallic chemical vapor deposition, Appl. Phys. Lett. 72 701, 1998.
- [5] Kapplet M., Grundmann M., Krost A., Turck V. and Bimberg D. InGaAs quantum wires grown by low pressure metalorganic chemical vapor deposition on InP V-grooves, Appl. Phys. Lett. 68 3596, 1996.
- [6] Turck V., Stier O., Heinrichsdorff F., Grundmann M. and Bimberg D. Electron quantum wires in type II single heterostructures on nonplanar substrates, Appl. Phys. Lett. 67 1712, 1995.
- [7] Gustafsson A., Reinhardt F., Biasiol G., and Kapon E., Low-pressure organometallic chemical vapor deposition of quantum wires on V-grooved substrates, Appl. Phys. Lett, 95 3673, 1995.
- [8] Wang X. L., Ogura M. and Matsuhata H., Flow rate modulation epitaxy of $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$ quantum wires on nonplanar substrate, Appl. Phys. Lett. 66 1506, 1995.

- [9] Biasiol G., and Kapon E., Ducmmun Y. and Gustafsson A., Self-ordering of quantum-wire superlattices on V-grooved substrates, Phys. Rev B 57 R9416, 1998.
- [10] Ishikawa Y., Shibata N. and Fukatsu S., Creation of [110]-aligned Si quantum wires encompassed by SiO₂ using low-energy separation-by-implanted-oxygen on a V-groove patterned substrate 1998 Appl. Phys. Lett. 72 2592.
- [11] Ammann C., Dupertius M. A., Bockelmann U., and Deveaud B., Electron relaxation by LO phonons in quantum wires: An adiabatic approach Phys. Rev B 55 2420, 1997.
- [12] Pescetelli S., Di Carlo A. and Lugli P., Conduction-band mixing in T- and V-shaped quantum wires, Phys. Rev B 56 R1668, 1997.
- [13] Saar A., Calderon S., Givant A., Ben-Shalom O., Kapon E. and Caneau C., Energy subbands, envelope states, and intersubband optical transitions in one-dimensional quantum wires: The local-envelope-states approach, Phys. Rev B 54 2675, 1996.
- [14] Goldoni G., Rossi F., Molinari E., Fasolino A., Rinaldi R. and Cingolani R., Valence band spectroscopy in V-grooved quantum wires, Appl. Phys. Lett. 69 2965, 1996.
- [15] Rossi F., Molinari E., Coulomb-Induced Suppression of Band-Edge Singularities in the Optical Spectra of Realistic Quantum-Wire Structures, Phys. Rev. Lett. 76 3642, 1996.
- [16] Arfken G. *Mathematical Methods for Physics*, (1985).
- [17] Geraldo C. and Geraldo W., Electron and hole states in V-groove quantum wires: an effective potential calculation, Semicond. Sci. Technol. 14 690, 1999.
- [18] Zarezadeh M. and Tavasoli M. K., Solution of the Schrödinger equation for a particular form of Morse potential using the Laplace transform, Chinese Phys. C. 33 1-4, 2009.
- [19] Sadeghi E. and Khordad R, Lashinzadegan A. International conference on nanotechnology, Iran (2007).