

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده : فیزیک

گروه : حالت جامد

رساله دکتری

مطالعه نظری خواص الکترونی، اپتیکی و مغناطیسی نانو ساختارهای نیمرسانا

مهدی سلیمانی

اساتید راهنما :

دکتر مرتضی ایزدی فرد

دکتر هادی عربشاهی

استاد مشاور

دکتر محمد رضا سرکرده ای

اسفند ۱۳۹۱

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده : فیزیک

گروه : فیزیک

رساله دکتری آقای مهدی سلیمانی

تحت عنوان: مطالعه نظری خواص الکترونی، اپتیکی، مغناطیسی نانو ساختارهای نیم رسانا

در تاریخ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد
(رساله دکتری) مورد ارزیابی و با درجه مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	اساتید مشاور	امضاء	اساتید راهنما
	نام و نام خانوادگی : محمد رضا سرکرده ای		نام و نام خانوادگی : مرتضی ایزدی فرد
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی : هادی عربشاهی

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :

تقدیم اثر

الهی هب لی کمال الانقطاع الیک و انر ابصار قلوبنا بضیاء نظرها الیک، حتی
تخرق ابصارالقلوب حجب النور فتصل الی معدن العظمه و تصیر ارواحنا معلقه
بعز قدسک

فرازی از مناجات شعبانیه

تقدیم به آنان که دانایی را به ما هدیه کردند.

تشکر و قدردانی

پیش از هر چیز ممنون الطاف الهی هستم که راه پشت سر گذاردن این دوره تحصیلی را برای من هموار نمود.

بعد از آن لازم می دانم از صمیم قلب از مادر عزیزم، و همکاری و صبر همسر مهربانم تقدیر و تشکر نمایم.

همچنین از اساتید محترم راهنما آقای دکتر مرتضی ایزدی فرد و آقای دکتر هادی عربشاهی و همچنین استاد مشاور محترم آقای دکتر محمدرضا سرکرده ای کمال قدردانی و سپاس را دارم.

در پایان از همکاری آقای دکتر خوش نگار به خاطر همفکری در مورد روش k.p، دکتر Hye-jung Kim به خاطر کمک در روش برنامه نویسی کامپیوتری نظریه تابعی چگالی اسپینی دمای محدود، مهندس محمد علی واحدی به خاطر مباحثات روشنگرانه پیرامون روش الگوریتم ژنتیک و محسن سلمانی به خاطر همکاری در بر طرف کردن تعدادی از مشکلات کامپیوتری تشکر می کنم.

دانشجو تأیید می نماید که مطالب مندرج در این پایان نامه (رساله) نتیجه تحقیقات خودش می باشد و در صورت استفاده از نتایج دیگران مرجع آن را ذکر نموده است.

کلیه حقوق مادی مترتب از نتایج مطالعات ، آزمایشات و نوآوری ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه (رساله) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد .

اسفند ۱۳۹۱

چکیده

در این کار خواص الکترونی، اپتیکی و مغناطیسی نانو ساختارهای بر پایه ترکیبات نیمرسانای گروه III-V با استفاده از روشهای محاسباتی مطالعه شده است. در این مطالعه از روش های مونت کارلو، ترکیبی ژنتیک-مونت کارلو-وردشی، ترکیبی ژنتیک-مونت کارلو-وردشی بایاس شده (ترکیب با روش برون یابی)، تفاضل محدود، ماتریس چگالی فشرده، ماتریس انتقال، مرز عبوری کوانتومی، نظریه تابعی چگالی اسپینی وابسته به دما و $k.p$ شش نواره خودسازگار استفاده شده است. در فصل های دوم و سوم این رساله الگوریتم های روش های محاسباتی هیبریدی استفاده شده تشریح شده اند. بررسی رفتار یک اکسیتون مقید در چاه های کوانتومی یگانه $GaAl_{0.7}Sb_{0.3}/GaAs$ و $GaAl_{0.7}As_{0.3}/GaAs$ و مقایسه نتایج بدست آمده با کارهای دیگران نشانگر دقت بالای روش های ترکیبی اشاره شده می باشد. در فصل ۴ معادله شرودینگر با کمک تقریب توابع پوش برای چاه های کوانتومی چندگانه GaN/AlN و $GaAl_{0.7}As_{0.3}/GaAs$ با عرض کل ثابت حل شده و با کمک روش ماتریس چگالی فشرده ویژگیهای اپتیکی این ترکیبات مورد بررسی قرار گرفته است. در این کار اثر تعداد چاهها روی انرژی زیر نوارها، انرژی های گذار، انرژی فرمی، تابع موج حالت پایین سیستم، ضرایب جذب خطی، غیر خطی و کل و همچنین ضرایب شکست خطی، غیر خطی و کل به ازای تعداد چاههای مختلف و طول کلی ثابت بررسی شده است. همچنین اثر یک میدان مغناطیسی اعمالی در راستای رشد ساختارها روی پارامتر های فوق الذکر و همچنین قدرت نوسانگری مورد بررسی قرار گرفته است. در فصل ۵ با کمک روشهای ماتریس انتقال، تفاضل محدود و روش مرز عبوری کوانتومی روند تولید ریزنوارها در ابر شبکه های GaN/AlN با طول موثر کلی ثابت و تعداد چاههای مختلف بررسی شده است. این بررسی با کمک محاسبه مستقیم زیرترازها و همچنین محاسبه ضرایب عبور برپایه روش ماتریس انتقال انجام شد. سپس با

کمک روش مرز عبوری کوانتومی ضرایب عبور برای الکترونهای با اسپین بالا و پایین و همچنین قطبش اسپینی در ساختار $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$ در حضور برهمکنش اسپین مدار در سلهاوس مورد بررسی قرار گرفته است. در فصل ۶ با استفاده از نظریه تابعی چگالی اسپینی وابسته به دما در حضور پتانسیل برهمکنش تبادلی-همبستگی و دما رفتار یک گاز الکترون دو بعدی محصور در چاه های کوانتومی چندگانه $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$ بررسی شده است. در این فصل همچنین با کمک روش $k.p$ شش نواره خودسازگار وابستگی دمایی به بررسی قطبش اسپینی یک گاز حفره دو بعدی در چاه کوانتومی $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}/\text{GaMnAs}$ پرداخته شده است.

کلمات کلیدی: نانو ساختارهای نیمرسانا، ترکیبات نیمرسانای گروه III-V، روشهای

محاسباتی هیبریدی، روش مونت کارلو، روش الگوریتم ژنتیک، نظریه تابعی چگالی اسپینی وابسته به دما، نظریه $k.p$ ، روش ماتریس انتقال، روش مرز عبوری کوانتومی، روش تفاضل محدود، قطبش اسپینی، گاز الکترون دو بعدی، گاز حفره دو بعدی، برهمکنش اسپین مدار در سلهاوس.

لیست مقالات مستخرج از رساله:

Journal Papers:

- 1- **Solaimani M.**, Izadifard, M., Arabshahi H., Sarkardehi M. R., Study of optical non-linear properties of a constant total effective length multiple quantum wells system, **J. Luminescence**, 134, 699 (2013).
- 2- **Solaimani M.**, Izadifard, M., Arabshahi H., Sarkardehi M. R., Effect of the magnetic field on optical properties of GaN/AlN multiple quantum wells, **J. Luminescence** 134, 88 (2013).
- 3- **Solaimani M.**, Izadifard, M., Arabshahi H., Sarkardehi M. R., Magnetic Field Dependence Optical Properties of GaN/AlN Multiple Quantum Wells , **Optik** (2012)
- 4- **Solaimani M.**, Izadifard, M., Arabshahi H., Sarkardehi M. R., Challenges in Application of a Monte Carlo Method to study an Exciton Confined in AlGaAs/GaAs Single Quantum Well, **International Journal of Modern Physics B**, 26, 1250129 (2012).
- 5- **Solaimani M.**, Izadifard, M., Arabshahi H., Sarkardehi M. R., Monitoring of the Genetic Algorithm Operators in Application to the GaAs_{0.7}Sb_{0.3}/GaAs single Quantum Well Nanostructure, **International Journal of Physical Sciences**, 7, 5485 (2012).
- 6- **Solaimani M.**, Izadifard, M., Arabshahi H., Sarkardehi M. R., A new approach based on genetic algorithm in Schrödinger equation solution for nanostructure applications: the effect of some genetic and Monte Carlo operators, **International Journal of Physical Sciences**, 6, 5364 (2011).
- 7- **Solaimani M.**, Izadifard, M., Arabshahi H., Sarkardehi M. R., **JOURNAL OF NANO-AND ELECTRONIC PHYSICS**, 4, 04012 (2012).
- 8- **Solaimani M.**, Izadifard, M., Arabshahi H., Sarkardehi M. R. and Salmani M., Some new aspect of the application of Genetic algorithm to investigate nanostructures, **Journal of Engineering and Technology Research** 2, 245(2010)

Conference papers:

- 9- Izadifard, M., Sarkardehi M. R., **Solaimani M.**, A new hybrid method consisting of Genetic algorithm to investigate magnetic properties of

nanostructures, **Annual Iranian physics conference**, sep. 11-14 2010 (Hamedan-Iran).

- 10- **Solaimani M.**, Izadifard, M., Arabshahi H., Sarkardehi M. R., *Variable and Uniform mesh Finite Difference Schema for the investigation of an exciton confined in a GaAsSb/GaAs quantum well with weak type I Conduction band*, **17th Annual IASBS Meeting on Condensed Matter Physics**, May 26-27, 2011(Zanjan-Iran)
- 11- **Solaimani M.**, Izadifard, M., Arabshahi H., Sarkardehi M. R., *Calculation of Confined Exciton Binding Energy in GaAsSb/GaAs Single Quantum Well by a New Modified Genetic Algorithm*, **Annual Iranian physics conference**, 2012 (yazd-Iran)
- 12- **Soleimani, M.**, Izadifard, M., *Investigation of the temperature effect on spin polarization of a two dimensional electron gas confined within Al_{0.3}Ga_{0.7}As multiple quantum well systems*, **condensed matter physics conference**, 2013 (shahrood-Iran)

فهرست

فصل ۱: مقدمه ای بر فیزیک مواد نیمرسانا و رهیافتهای محاسباتی.....	۱۹
۱.....	۲۰
۲-۱ نانوفناوری.....	۲۲
۱-۲-۱ نانوساختارهای نیمرسانا.....	۲۳
۳-۱ اکسیتون ها در یک نیمرسانا.....	۲۶
۱-۳-۱ انواع اکسیتون:.....	۲۸
۴-۱ نیمرساناهای مغناطیسی.....	۲۹
۵-۱ جابجایی دیامغناطیسی.....	۳۰
۶-۱ گاز الکترون وحفره دو بعدی.....	۳۱
۷-۱ ساختارهای بررسی شده در این رساله.....	۳۲
۸-۱ رهیافتهای محاسباتی.....	۳۳
فصل ۲: معرفی الگوریتم ژنتیک و استفاده از آن برای بررسی جابجایی دیامغناطیسی و رفتار اکسیتون	
های مقید در چاههای کوانتومی $GaAl_{0.7}As_{0.3}/GaAs$, $GaAs_{0.7}Sb_{0.3}/GaAs$	۳۹
۲.....	۴۰
۱-۲ معرفی الگوریتم ژنتیک.....	۴۰
۱-۱-۲ ساختار الگوریتم ژنتیک.....	۴۱
۲-۱-۲ کاربرد الگوریتم ژنتیک.....	۴۵
۲-۲ رهیافت بررسی اکسیتون های مقید در چاه های کوانتومی.....	۴۷
۳-۲ نکات مهم در اعمال کامپیوتری روش ژنتیک-مونت کارلو-وردشی (GMV) و مواردی که ممکن	
است به نتایج اشتباه بیانجامد:.....	۶۱
نتیجه گیری.....	۶۲
فصل ۳: الگوریتم های تفاضل محدود و مونت کارلو برای بررسی رفتار اکسیتون های مقید در چاههای	
کوانتومی یگانه $GaAl_{0.7}As_{0.3}/GaAs$ و $GaAs_{0.7}Sb_{0.3}/GaAs$	۶۴
۳.....	۶۵
۱-۳ روش تفاضل محدود برای حل معادله شرودینگر وابسته به یک اکسیتون مقید در چاه کوانتومی یگانه	
$GaAs_{0.7}Sb_{0.3}/GaAs$	۶۵
۱-۱-۳ مقدمه.....	۶۵
۲-۱-۳ رهیافت:.....	۶۶
۲-۳ روش مونت کارلو برای حل معادله حاکم بر یک اکسیتون مقید در چاه های کوانتومی یگانه	
$GaAl_{0.7}As_{0.3}/GaAs$ و $GaAs_{0.7}Sb_{0.3}/GaAs$	۶۹
۱-۲-۳ مقدمه.....	۶۹
۲-۲-۳ رهیافت.....	۷۱

۷۴.....	۳-۲-۳ حساب وردشی
۷۵.....	۳-۲-۴ نتایج و بحث
۸۳.....	نتیجه گیری
	فصل ۴: الگوریتم تفاضل محدود برای بررسی : ویژگیهای اپتیکی چاههای کوانتومی چند گانه GaN/AlN
۸۵.....	GaAl _{0.7} As _{0.3} /GaAs -
۸۵.....	۴
۸۶.....	۴-۱ مقدمه
۸۸.....	۴-۲ رهیافت
۹۱.....	۴-۳ نتایج و بحث
	۴-۳-۱ بررسی خواص نوری چاههای کوانتومی چندگانه GaAl _{0.7} As _{0.3} /GaAs
	۴-۳-۲ بررسی خواص نوری چاههای کوانتومی چندگانه GaN/AlN در میدان مغناطیسی خارجی
۱۱۰.....	نتیجه گیری
	فصل ۵: الگوریتم های تفاضل محدود، ماتریس انتقال و مرز عبوری کوانتومی برای بررسی : الف:
	ویژگیهای مغناطیسی (فیلتر اسپینی)، ب: مطالعه سازوکار تولید ریز نوار در ابر شبکه های GaN/AlN و
۱۱۲.....	GaAl _{0.7} As _{0.3} /GaAs
۱۱۳.....	۵
۱۱۳.....	۵-۱ بررسی ریز نوارهای ابر شبکه های GaN/AlN با عرض موثر کلی ثابت
۱۱۳.....	۵-۱-۱ مقدمه
۱۱۳.....	۵-۱-۲ رهیافت محاسبات
۱۱۴.....	۵-۱-۳ نتایج و بحث:
۱۱۹.....	نتیجه گیری
	۵-۲ فیلتر های اسپینی بر پایه چاههای کوانتومی چند گانه GaAs/GaAl _{0.7} As _{0.3} با طول موثر کلی
۱۲۱.....	ثابت
۱۲۱.....	۵-۲-۱ مقدمه
۱۲۲.....	۵-۲-۲ رهیافت
۱۲۲.....	۵-۲-۳ نتایج و بحث:
۱۲۷.....	نتیجه گیری
	فصل ۶: الگوریتم های: نظریه تابعی چگالی اسپینی وابسته به دما و روش خودسازگار K.P شش نواره
	برای بررسی : الف: اثرات دما بر قطبش اسپینی گاز الکترون دو بعدی، ب: مطالعه اثرات آلاینش عنصر
	مغناطیسی منگنز و دما بر گاز حفره دو بعدی محصور در چاههای کوانتومی چند گانه GaN/AlN ,
۱۲۹.....	GaAl _{0.7} As _{0.3} /GaAs
۱۳۰.....	۶
	۶-۱ بررسی اثر دما قطبش اسپینی یک گاز الکترون دو بعدی محصور در چاه کوانتومی چندگانه
۱۳۰.....	Al _{0.3} Ga _{0.7} As/GaAs به روش الگوریتم تابعی چگالی اسپینی وابسته به دما
۱۳۰.....	۶-۱-۱ مقدمه
۱۳۱.....	۶-۱-۲ رهیافت محاسبات
۱۳۳.....	۶-۱-۳ نتایج و بحث
۱۳۶.....	نتیجه گیری

۲-۶ حل خودسازگار معادله شرودینگر - پواسون به روش K.P شش نواره برای بررسی قطبش اسپینی	
یک گاز حفره دو بعدی محصور در چاه کوانتومی چند گانه $\text{GaAs/GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaMnAs}$ ۱۳۸	
۱-۲-۶ مقدمه ۱۳۸	
۲-۲-۶ رهیافت محاسبات ۱۳۹	
نتایج و بحث: ۱۴۱	
نتیجه گیری ۱۴۶	
پیوست الف: آماده کردن ورودی های برنامه الگوریتم ژنتیک ۱۴۸	
مراجع ۱۵۱	

فهرست شکلها

- شکل ۱-۱ حدود مقاومت الکتریکی مواد (رساناها، نیمرساناها و عایقها)..... ۲۰
- شکل ۲-۱ اندازه شکاف انرژی در مواد مختلف. ضلع عمودی جعبه های نشانگر انرژی های مجاز است. مناطق هاشور زده مناطق پر شده با الکترونها است. تفاوت یک نیمه فلز نظیر بیسموت و یک نیمرسانا مثل سیلیکون این است که در صفر مطلق سیلیکون (خالص) عایق کامل است..... ۲۱
- شکل ۳-۱ تشکیل نوارهای انرژی از ترازهای اتمی با کاهش ثابت شبکه. با کاهش ثابت شبکه همپوشانی توابع موج اتمی بیشتر می شود، ترازهای انرژی جابجا شده و تبهگنی چندگانه برداشته می شود. بنابراین با کاهش ثابت شبکه ترازهای اتمی پهنتر شده و نوارها شکل می گیرند..... ۲۱
- شکل ۴-۱ چگالی حالات در نانوساختارهای مختلف..... ۲۴
- شکل ۵-۱ طرح واره ای از یک ساختار چاه کوانتومی $\text{GaAs/GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}$ یگانه..... ۲۵
- شکل ۶-۱ طرح واره ای از یک ابر شبکه $\text{GaAs/GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}$ و ریزنوارهای تشکیل شده در آن..... ۲۵
- شکل ۷-۱ نمایی از تحریک یک الکترون، باز ترکیب ها و انرژی بستگی اکسیتون..... ۲۶
- شکل ۸-۱ طرح واره ای برای مقایسه اکسیتون وانیر-مات در مقایسه با اتم هیدروژن. این دو سیستم شعاع بوهر و انرژی بستگی متفاوتی دارند. بر عکس اتمها اکسیتونها طول عمر محدودی دارند..... ۲۷
- شکل ۹-۱ طرح واره ای از یک ماده فرو مغناطیس (الف)، یک ماده پارامغناطیس در غیاب میدان مغناطیسی خارجی (ب-۱) و یک ماده پارامغناطیس در حضور میدان مغناطیسی خارجی..... ۲۹
- شکل ۱۰-۱ طرح واره ای یک ماده فری مغناطیس (الف) و یک ماده آنتی فرو مغناطیس..... ۲۹
- شکل ۱۱-۱ طرح واره ای از تشکیل گاز الکترون دو بعدی در یک ساختار ناهمگون..... ۳۱
- شکل ۱۲-۱ مقایسه ای بین روشهای مختلف موجود برای بررسی سیستم های بس ذره ای در گستره های زمانی مکانی مختلف. اعداد نشان داده شده روی محور ها باید در توان ۱۰ قرار بگیرند. رهیافتهای مقایسه شده عبارتند از: مونت کارلو کوانتومی (QMC)، نظریه تابعی چگالی (DFT)، تقریب تنگ بست..... ۳۶
- شکل ۱-۲ الگوریتم محاسباتی ژنتیک..... ۴۳
- شکل ۲-۲ مراحل الگوریتم ژنتیک مورد استفاده توسط گروه دیون برای محاسبه ساختار حالت پایه نانوخوشه ها [۲۶]..... ۴۵
- شکل ۳-۲ ریخت شناسی تعدادی از نانوسیمهای طلا که توسط گروه ونگ بررسی شده است [۵۳]..... ۴۶
- شکل ۴-۲ نمودار گردشی الگوریتم ژنتیک مورد استفاده در این مطالعه..... ۵۰
- شکل ۵-۲ جابجایی دیامغناطیسی بر حسب تعداد جمعیت در هر نسل. خط چین مقدار میانگین را نشان می دهد..... ۵۱
- شکل ۶-۲ تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک..... ۵۲
- شکل ۷-۲ زمان اجرای برنامه بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک..... ۵۲
- شکل ۸-۲ تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک..... ۵۳
- شکل ۹-۲ تغییرات جابجایی دیا مغناطیسی بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک و میدان مغناطیسی اعمال شده..... ۵۴
- شکل ۱۰-۲ جابجایی دیامغناطیسی بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک در میدان $B=12\text{T}$ ، تعداد جمعیت ۱۰۰..... ۵۵
- شکل ۱۱-۲ تغییرات جابجایی دیا مغناطیسی بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک و میدان $B=12\text{T}$ مغناطیسی..... ۵۵
- شکل ۱۲-۲ تغییرات جابجایی دیا مغناطیسی بر حسب جمعیت و میدان مغناطیسی..... ۵۶

شکل ۲-۱۳ تغییرات جابجایی دیا مغناطیسی بر میدان مغناطیسی بدست آمده توسط روش ما و روش تجربی	۵۶
مرجع [۴۰].....	۵۶
شکل ۲-۱۴ نمودار گردشی روش ژنتیک-مونت کارلو-وردشی متمایل (BGMV).....	۵۷
شکل ۲-۱۵ نمودار تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تعداد میانگین گیری به در حالات مختلف با ورودی	
های جدول (۲-۲).....	۵۸
شکل ۲-۱۶ نمودار تعداد حالات تکراری در جمعیت بصورت تابعی از تعداد تکرار حلقه ژنتیک با تغییر مقدار های	
درصد نخبگی ، $\epsilon_{percent}$ و احتمال جهش.....	۵۹
شکل ۳-۱ تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تغییرات عرض چاه.....	۶۷
شکل ۳-۲ نمودار تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تعداد نقاط نمونه برداری در انتگرال مونت کارلو.....	۷۵
شکل ۳-۳ نمودار تغییرات زمان اجرای برنامه بر حسب تعداد نقاط نمونه برداری در انتگرال مونت کارلو.....	۷۵
شکل ۳-۴ نمودار تغییرات پارامتر های ازاد توابع موج آزمون بر حسب عرض چاه. تغییرات پارامترهای در معادله	
۳-۱۴ در گستره $[0, 1000]$	۷۶
شکل ۳-۵ نمودار تغییرات پارامتر های ازاد توابع موج آزمون بر حسب عرض چاه. تغییرات پارامتر a و λ در	
معادله ۳-۱۶ به ترتیب درگستره های $[0, 1]$ و $[0, 10^8]$	۷۶
شکل ۳-۶ نمودار تغییرات پارامتر های ازاد توابع موج آزمون بر حسب عرض چاه. تغییرات پارامتر a و λ در	
معادله ۳-۱۶ هر دو درگستره $[0, 10^4]$	۷۷
شکل ۳-۷ نمودار تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب عرض چاه برای توابع موج آزمون مختلف و گستره	
های مختلف برای پارامتر های آزاد. برای مقایسه نتایج مراجع ۲۰ و ۲۱ هم رسم شده است.....	۷۷
شکل ۳-۸ نمودار تغییرات پارامتر جدایی کولنی η بر حسب عرض چاه پتانسیل.....	۷۸
شکل ۳-۹ نمودار شماتیک تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب عرض چاه.....	۷۹
شکل ۳-۱۰ نمودار تغییرات خطای انتگرال گیری مونت کارلو بر حسب عرض چاه پتانسیل برای حالات مختلف	
تابع موج آزمون و گستره های مختلف به ازای پارامتر های آزاد.....	۸۰
شکل ۳-۱۱ نمودار تغییرات انرژی بستگی اکسیتون در معادلات ۱ و ۶ و ۸ از بخش ۳-۲-۲ بر حسب عرض چاه.	
برای مقایسه نتایج حاصل از کارهای مراجع ۲۰ و ۲۱ نیز رسم شده اند.....	۸۰
شکل ۳-۱۲ نمودار تغییرات خطای انتگرال گیری مونت کارلو در معادلات ۱ و ۶ و ۸ از بخش ۳-۲-۲ بر حسب	
عرض چاه.....	۸۱
شکل ۳-۱۳ نمودار تغییرات پارامتر ازاد γ_x تابع موج آزمون ۳-۱۱ بر حسب عرض چاه.....	۸۱
شکل ۴-۱ محدوده فرکانسی و انرژی امواج الکترومغناطیسی و تعدادی از مثالهای نوعی.....	۸۶
شکل ۴-۲ محدوده فرکانسی و انرژی امواج نور مرئی.....	۸۶
شکل ۴-۳ اثر تعداد چاهها روی الف: انرژی زیر نوارها و ب: انرژی های گذار.....	۹۱
شکل ۴-۴ اثر تعداد چاهها روی انرژی فرمی.....	۹۲
شکل ۴-۵ اثر تعداد چاه روی موقعیت ۴ تابع موج حالت پایین سیستم.....	۹۳
شکل ۴-۶ ضریب جذب برای ۴ تعداد چاه مختلف ۱ و ۳ و ۱۰ و ۱۸.....	۹۴
شکل ۴-۷ نمودار ضرایب جذب بر حسب تعداد چاه. الف: ضریب جذب خطی ب: ضریب جذب غیر خطی ج: ضریب	
جذب کل.....	۹۵
شکل ۴-۸ اثر تعداد چاه روی رفتار ضریب شکست خطی، غیر خطی و کل چاههای کوانتومی چند گانه با ۱ و ۳	
۱۰ و ۱۸ چاه.....	۹۶

- شکل ۴-۹ اثر تعداد چاه روی (الف): ضریب شکست خطی، (ب): ضریب شکست کل و (ج) و (د): ضریب شکست غیر خطی چاههای کوانتومی چند گانه. در قسمت (ج) ضریب ۱۰۶ برای چاه های به غیر از چاه کوانتومی یگانه می باشد. ۹۷.....
- شکل ۴-۱۰ اثر تعداد چاهها روی انرژی زیر ترازهای چاههای کوانتومی چند گانه GaN/AlN با عرض کلی ثابت ۶۰ نانومتر. ۸۸.....
- شکل ۴-۱۱ اثر میدان مغناطیسی خارجی (در راستای رشد) روی انرژی زیر ترازهای چاههای کوانتومی چند گانه با تعداد چاه مختلف. ۱۰۰.....
- شکل ۴-۱۲ اثر میدان مغناطیسی روی جایگزیدگی تابع موج حالت پایه یک چاه کوانتومی سه گانه GaN/AlN. ۱۰۱.....
- شکل ۴-۱۳ نمودار تغییرات ضریب جذب کل بر حسب انرژی فوتون فرودی و میدان مغناطیسی اعمالی برای چاههای کوانتومی n گانه GaN/AlN. ۱۰۳.....
- شکل ۴-۱۴ تغییرات ضریب جذب مرتبه چاههای کوانتومی n گانه بر حسب انرژی فوتون فرودی و میدان مغناطیسی اعمالی. ۱۰۴.....
- شکل ۴-۱۵ نمودار تغییرات ضریب شکست کل بر حسب انرژی فوتون فرودی و میدان مغناطیسی اعمالی برای چاههای کوانتومی n گانه GaN/AlN. ۱۰۶.....
- شکل ۴-۱۶ اثر میدان مغناطیسی روی ضریب شکست کل چاه کوانتومی سه گانه GaN/AlN. ۱۰۷.....
- شکل ۴-۱۷ اثر تعداد چاه کوانتومی و انرژی فوتون فرودی و میدان مغناطیسی روی ضریب شکست مرتبه سوم چاههای کوانتومی n گانه. ۱۰۸.....
- شکل ۴-۱۸ اثر تعداد چاه و میدان مغناطیسی روی شدت نوسانگر چاههای کوانتومی n گانه. ۱۰۹.....
- شکل ۵-۱ نمودار تغییرات انرژی ریزنوارها بر حسب تعداد چاه برای سیستم چاه کوانتومی چند گانه AlN/GaN
- الف: چاه کوانتومی چندگانه با عرض ثابت یک نانومتر (عرض کل غیر ثابت) ب: چاه کوانتومی چندگانه با عرض کل ثابت ۴۰ نانومتر ج: ۶۰ چاه کوانتومی چندگانه با عرض کل ثابت نانومتر. ۱۱۴.....
- شکل ۵-۲ عرض سه ریزنوار اول و دو گاف ریزنوار برای ابر شبکه با طول کلی ثابت ۶۰ نانومتر. ۱۱۵.....
- شکل ۵-۳ نمودار ضرایب عبور بر حسب انرژی ذره فرودی برای ساختار چاه کوانتومی چندگانه GaN/AlN با عرض کل ۶۰ نانومتر. ۱۱۶.....
- شکل ۵-۴ نمودار ضرایب عبور یک ابر شبکه با عرض چاه ثابت یک نانومتر (عرض کل متغیر) AlN/GaN بر حسب انرژی ذره فرودی. ۱۱۷.....
- شکل ۵-۵ ضرایب عبور بر حسب انرژی در چاههای کوانتومی چند گانه GaAl_{0.7}As_{0.3}/GaAs با عرض کل ثابت ۶۰ (نانومتر). ۱۲۲.....
- شکل ۵-۶ ضرایب عبور مربوط به ذرات با اسپین بالا و پایین و همچنین قطبش اسپینی در چاههای کوانتومی GaAs/GaAl_{0.7}As_{0.3} با طول کلی ثابت ۶۰ نانومتر. ۱۲۵.....
- شکل ۶-۱ نمودار تغییرات انرژی فرمی بر حسب دما به ازای تعداد مختلف چاه. ۱۳۱.....
- شکل ۶-۲ تغییرات انرژی زیر ترازها بر حسب دما برای دو تراز انرژی الف: حالت پایه و ب: برانگیخته اول. ۱۳۲.....
- شکل ۶-۳ نمودار تغییرات چگالی ذرات با اسپین بالا و پایین بر حسب موقعیت مکانی و دما برای یک سیستم چاه کوانتومی چندگانه نوعی (در اینجا پنج گانه). ۱۳۳.....
- شکل ۶-۴ تغییرات قطبش خودبخودی بر حسب دما بر تعدادی چاه کوانتومی چند گانه (تا هفت چاه) با طول موثر کلی ثابت. تعداد چاهها در شکل آمده است. ۱۳۴.....
- شکل ۶-۵ یک طرح شماتیک از چاه کوانتومی مطالعه شده. منطقه آلایش بطور متقارن در وسط چاه قرار دارد. ۱۳۸.....
- شکل ۶-۶ تغییرات همگرایی چگالی بار بر حسب تعداد تکرار حلقه خود سازگار. ۱۴۰.....

- شکل ۶-۷ تغییرات انرژی حالت پایه بر حسب تعداد تکرار حلقه خود سازگار..... ۱۴۱
- شکل ۶-۸ تغییرات چگالی بار (cm^{-2}) بر حسب موقعیت مکانی ساختار (آنگستروم) $T=1.4\text{K}$ ۱۴۲
- شکل ۶-۹ تغییرات چگالی بار (cm^{-2}) بر حسب موقعیت مکانی ساختار (آنگستروم) $T=30\text{K}$ ۱۴۳
- شکل ۶-۱۰ تغییرات چگالی بار (cm^{-2}) بر حسب موقعیت مکانی ساختار در دمای الف، ۶۰ کلوین و ب) ۷۰ کلوین..... ۱۴۳
- شکل ۶-۱۱ تغییرات قطبش اسپینی حفره های آزاد بر حسب دما برای عرض های مختلف منطقه آرایش مغناطیسی در چاه کوانتومی یگانه..... ۱۴۴

فصل ۱: مقدمه‌ای بر فیزیک

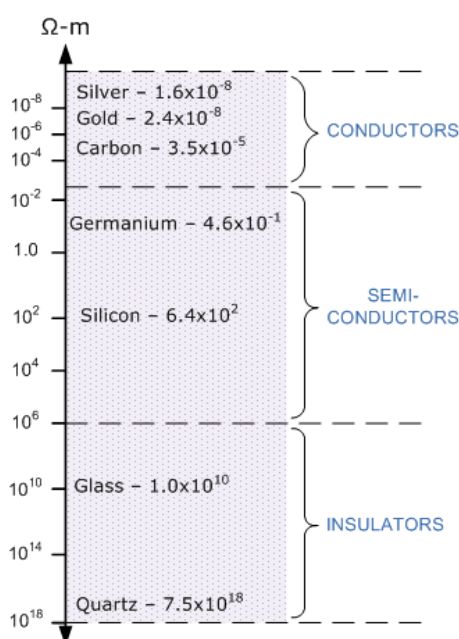
مواد نیمرسانا و رهیافت‌های

محاسباتی

“There’s plenty of room at the bottom!”

Richard P. Feynman, 1959

مواد جامد از نظر الکتریکی به رسانا، نارسانا و نیمرساناها تقسیم بندی می شوند. مقاومت الکتریکی مواد رسانای خالص در دماهای کم می تواند به مقدار کوچک $10^{-10} \Omega \cdot \text{cm}$ نیز برسد و نارساناها می توانند دارای مقاومت الکتریکی به بزرگی $10^8 \Omega \cdot \text{cm}$ باشند. مقاومت الکتریکی نیمرساناها بین این دو مقدار قرار دارد [۱].



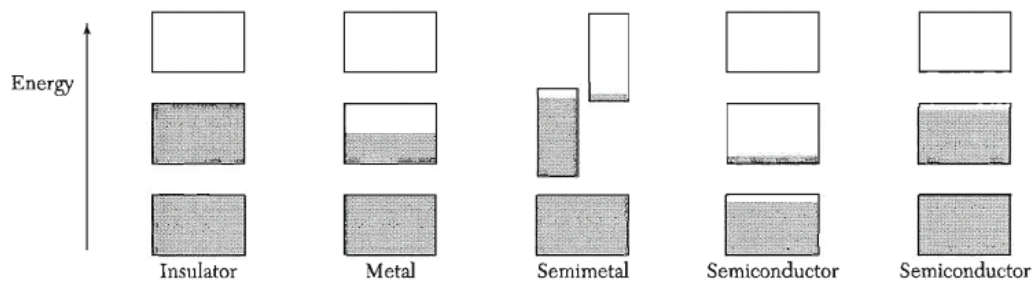
شکل ۱-۰ گستره مقاومت الکتریکی مواد (رساناها، نیمرساناها و نارساناها)

فیزیک حالت جامد به طور گسترده ای به مطالعه بلورها و الکترونهای موجود در آنها می پردازد. بلورها از تکرار منظم سنگ بناهای همانند (سلول واحد)^۱ ایجاد می شوند. بنابراین بلورها یک آرایه سه بعدی دوره ای از اتمها هستند. مواد نیمرسانا که معمولاً ساختار بلوری داشته و در صفر مطلق نارسانا هستند به علت ویژگیهای جالب توجه از جمله تنوع گاف نواری (حدود ۱ الی ۴ الکترون ولت) بطور گسترده ای در صنایع اپتوالکترونیک و اسپینترونیک مورد توجه قرار گرفته اند.

¹ Unit cell

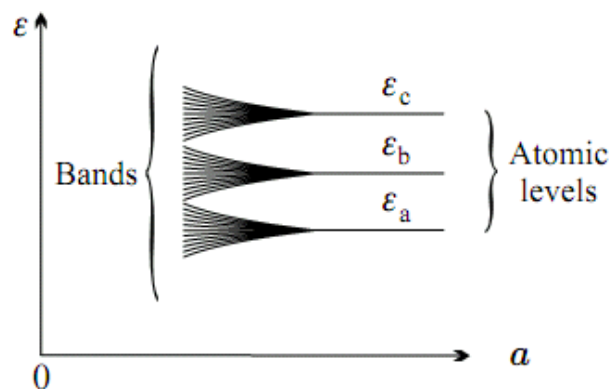
ویژگیهای نیمرساناها می توانند تا حد زیادی تحت تاثیر عواملی مانند دما، فشار، نوع و میزان آلودگی تغییر کنند.

الکترونهای داخل بلورها در حالات مجاز نوارهای انرژی قرار می گیرند.



شکل ۰-۲ اندازه شکاف انرژی در مواد مختلف. ضلع عمودی جعبه ها نشانگر انرژی های مجاز است. مناطق هاشور زده مناطق پر شده با الکترونها است. تفاوت یک نیمه فلز نظیر بیسموت و یک نیمرسانا مثل سیلیکون این است که در صفر مطلق سیلیکون (خالص) نارسانا است [۱].

برای درک بهتر مفهوم نوارهای انرژی در شکل ۱-۲، در ابتدا اتم های مجزا را در نظر می گیریم و سپس آنها را در کنار یکدیگر قرار می دهیم تا یک جسم جامد را تشکیل دهند. هنگامی که اتمها را به یکدیگر نزدیک می کنیم، الکترونها تحت تاثیر هسته های مجاور و همچنین الکترونهای همسایه قرار خواهند گرفت.



شکل ۰-۳ تشکیل نوارهای انرژی از ترازهای اتمی با کاهش ثابت شبکه. با کاهش ثابت شبکه همپوشانی توابع موج اتمی بیشتر می شود، ترازهای انرژی جابجا شده و تبهگنی چندگانه برداشته می شود. بنابراین با کاهش ثابت شبکه ترازهای اتمی پهنتر شده و نوارها شکل می گیرند.

الکترونها به تدریج با نزدیک شدن بیشتر اتمها اثرات بیشتری بر هم می گذارند و زمانی که این نزدیکی اتمها منجر به تشکیل مولکول گردد هر تراز اتمی به ترازهای مولکولی چندتایی شکافته می

شود، به این پدیده پهن شدگی تراز گفته می شود (شکل ۱-۳). این ترازهای انرژی پیوسته پهنای انرژی مشخصی دارند و به نوارهای انرژی معروفند [۲].

۲-۱ نانوفناوری

پیش بینی خواص مواد در مقیاس نانو به زمانهای بسیار گذشته بازمی گردد. در آن هنگام که ریچارد فاینمن، فیزیکدان و برنده جایزه نوبل ۱۹۶۵، در سخنرانی معروف خود در تاریخ ۲۹ دسامبر ۱۹۵۹ در انجمن فیزیک آمریکا تحت عنوان «در پایین دست، فضای زیادی وجود دارد»^۱ درباره موتورهای الکتریکی به اندازه ناخن انگشت، مباحثی را مطرح نمود و ابزاری را پیش بینی کرد که می تواند متن کتاب مقدس را در سر یک سوزن جای دهد، کسی باور نمی کرد که روزی این کار امکان پذیر شود. برای داشتن معیاری از مقیاس نانو باید گفت اگر قطر یک تارموی معمولی انسان را ۸۰ هزار بار کوچکتر کنید، به ابعاد یک نانومتر می رسید. فناوری اطلاعات، فناوری نانو و فناوری زیست را می توان به عنوان سه فناوری عمده که به نظر می رسد آینده دنیا را به تسخیر خود در خواهند آورد نام برد. این سه فناوری در بسیاری از موارد همگرا می شوند و به هم ربط پیدا می کنند. شاید تصور کار در ابعاد نانو برای زیست شناسان کار ساده تری باشد زیرا آنها بهتر می دانند که در کوچک ترین سلول انسانی، همه اطلاعات مربوط به یک موجود زنده از قبیل رنگ مو، رشد استخوان و عصب ها وجود دارد. حتی در قسمت بسیار کوچکی از سلول به نام DNA که شامل حدود ۵۰ اتم است همه این اطلاعات ذخیره می گردد.

در چند دهه اخیر ساختار های با ابعاد کوچک مانند ابر شبکه های دو بعدی، نانوسیم ها و نانولوله های یک بعدی و نقاط کوانتومی صفر بعدی به خاطر اهمیت نظری و کاربردهای بالقوه آنها در صنایع اپتوالکترونیک و اسپینترونیک توجه زیادی را به خود جلب کرده اند. ابر شبکه ها^۲ ساختارهای دوره ای مصنوعی هستند که از کنار هم قرار گرفتن لایه های متناوب (معمولا از مرتبه

^۱ <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>

^۲ Superlattices

چند ده نانومتر) مواد مختلف با روشهای پیشرفته ای نظیر رو آراستی باریکه مولکولی^۱ (MBE)، روی یک بستر^۲، تولید می شوند. با توجه به ویژگی های الکترونیکی، اپتوالکترونیکی و حرارتی ابرشبهه ها می توان کاربردهای ویژه ای (با ترکیب مواد مختلف با ضخامت های متفاوت) از آنها به دست آورد. کاربردهای مختلف ابرشبهه ها در زمینه اپتوالکترونیک در سال ۱۹۸۹ توسط یاریو^۳ [۳] و در سال ۱۹۹۱ توسط وشباخ و وینتر^۴ [۴] بررسی شده است.

امروزه مواد جدید برای تحقق اهداف جدید بشر ساخته می شوند که می توانند چندکاره باشند، مثلاً تغییرات پیرامون خود را حس و پاسخگویی نمایند، ده برابر از فولاد محکمتر باشند، ده برابر از کاغذ سبکتر باشند، پارامغناطیس یا ابررسانا باشند، شفاف باشند و یا نقطه ذوب بالاتری داشته باشند. مواد جدید می توانند بهترین خواص دو یا چند ساختار شناخته شده را ترکیب نمایند.

۱-۲-۱ نانو ساختارهای نیم رسانا

با توجه به وابستگی چگالی حالات الکترونها یک سیستم (تعداد حالات مجاز در یک گستره انرژی معین) به ابعاد آن و نیز همزمان با پیشرفت فناوری رشد نیم رساناها، امکان تولید نانو ساختارهایی نظیر چاه کوانتومی، سیم کوانتومی و نقطه کوانتومی فراهم گردیده و قابلیت استفاده از این نوع ساختارها در صنایع جدید روز افزون گردیده است. در شکل ۱-۴ چگالی حالات مربوط به یک ماده حجمی و نانو ساختارهای چاه کوانتومی^۵، سیم کوانتومی^۶ و نقطه کوانتومی^۷ نشان داده شده است. ساختارهای کوانتومی با محدود نمودن درجات آزادی حرکت ذرات ایجاد می گردند. علت اینکه به این ساختارها، ساختارهای کوانتومی می گویند این است که محدودیت حرکت در فواصل در حد چند ده نانومتر سبب بروز خواص کوانتومی در سیستم می شود.

¹ Molecular beam epitaxy(MBE)

² Substrate

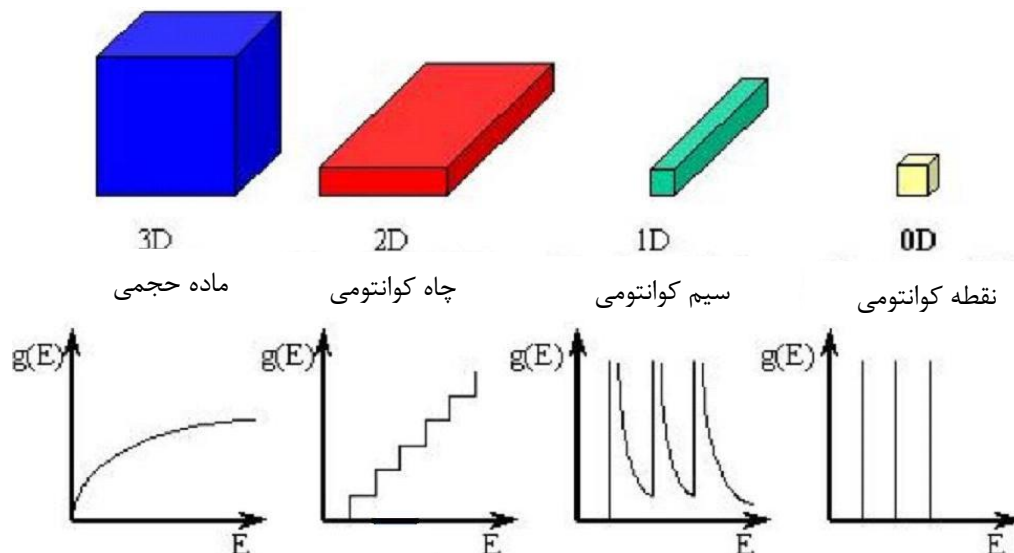
³ Yariv

⁴ Wesbach and Vinter

⁵ Quantum well

⁶ Quantum wire

⁷ Quantum dot



شکل ۴-۰ چگالی حالات الکترونها در نانو ساختارهای مختلف.

در صورتیکه محبوس سازی در یک بعد انجام شود ذره در دو بعد دیگر دارای طیف پیوسته انرژی می باشد و در یک بعد دارای ترازهای انرژی گسسته می باشد. به این ساختار چاه کوانتومی گفته می شود. اگر این محبوس سازی در دو بعد انجام پذیرد یک سیم کوانتومی و اگر در سه بعد انجام گیرد یک نقطه کوانتومی ایجاد خواهد شد.

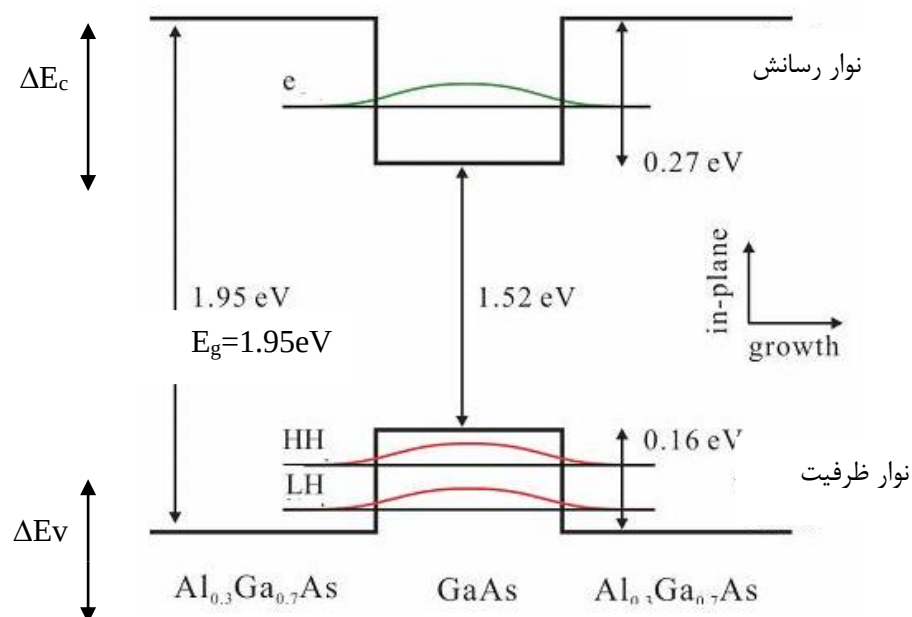
برای ساخت یک چاه کوانتومی نیاز به دو ماده با شکاف انرژی مختلف داریم. اگر نمونه با شکاف انرژی کوچکتر بین دو نمونه با شکاف انرژی بزرگتر قرار گیرد (حالت یک ساندویچ) یک چاه کوانتومی یگانه^۱ ایجاد می شود. ماده با گاف نواری (E_g) کوچکتر چاه و ماده با شکاف انرژی بزرگتر سد را ایجاد می کند. اختلاف انرژی سد و چاه در نوار رسانش (جداشدگی نوار رسانش) و اختلاف انرژی سد و چاه در نوار ظرفیت (جداشدگی نوار ظرفیت) را به ترتیب با ΔE_c و ΔE_v نشان می دهند.

از کنار هم قرار گرفتن چند چاه کوانتومی یگانه یک ساختار چاه کوانتومی چندگانه^۲ ایجاد می شود. یک ابر شبکه از تکرار تناوبی یک ساختار، نظیر یک چاه کوانتومی، ایجاد می شود. این کار

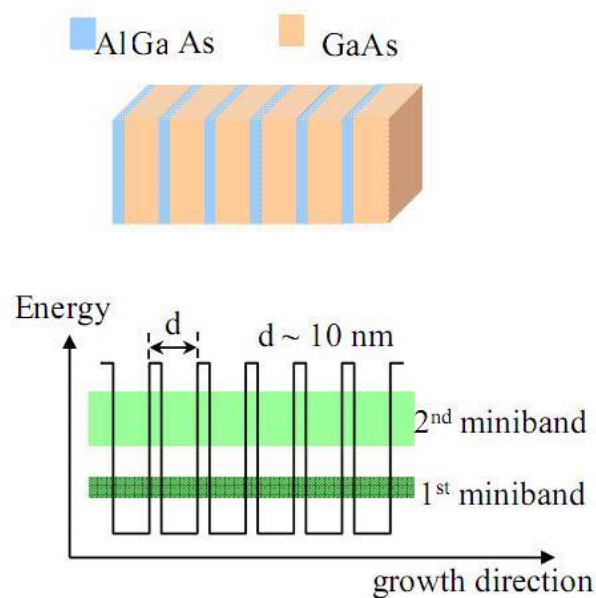
^۱ Single quantum well

^۲ Multiple quantum wells (MQWs)

اولین بار توسط کلدیش^۱ [۵] انجام شد. پیشنهاد او ایجاد ابرشبهه ها در ماده با کمک امواج ماورا صوت بود.



شکل ۵-۱ طرح واره ای از یک ساختار چاه کوانتومی یگانه GaAs/GaAl_{0.7}As_{0.3} شکل ۶-۱ نمایی از یک ابرشبهه بر پایه چاه کوانتومی GaAs/GaAlAs و ریزنوارهای تشکیل شده در آن را نشان می دهد.



شکل ۶-۰ طرح شماتیک از یک ابرشبهه نوعی GaAs/GaAlAs و ریزنوارهای تشکیل شده در آن.

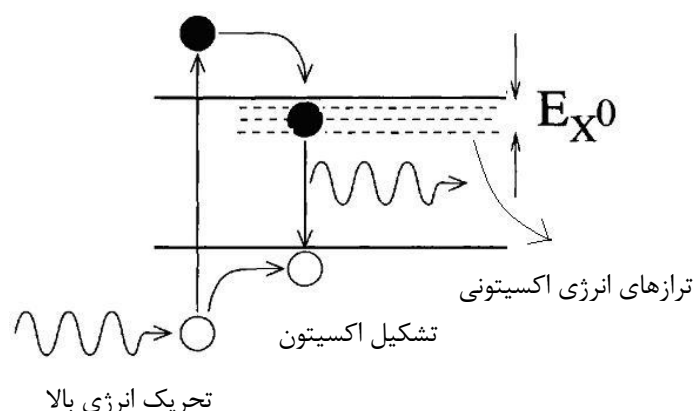
^۱ Keldysh

پس از آن ایساکي^۱ و تسو^۲ پیشنهاد تولید ابر شبکه ها با کمک آلایش و یا روشهای ترکیبی را ارائه نمودند [۵-۶]. با تکرار تناوبی دو ماده نیم رسانای A و B با ثابت شبکه مشابه می توان یک سیستم با تناوب ساختاری دوره ای مصنوعی ایجاد کرد. این ساختار متناوب نظیر آنچه در ساختار های دوره ای اتمی رخ می دهد منجر به تولید ریزنوارهای انرژی می شود. این ریزنوار ها می توانند منجر به تولید ویژگیهای نوری و الکترونی جدید در این نوع ساختارها شوند. تناوب مصنوعی ایجاد شده از تناوب شبکه بلوری بزرگتر و از طول موج دوبروی الکترونها کوچکتر است.

۳-۱ اکسیتون ها در یک نیم رسانا

انتشار مقالات مشهور فرنکل در سال ۱۹۳۱ منجر به پیشگویی آثار اکسیتونی^۳ گردید [۷] و گروس در سال ۱۹۵۱ موفق شد اکسیتون را به شکل تجربی در ماده نیم رسانای CuO_2 کشف نماید [۸]. ولی اکسیتون چیست؟

اگر فوتونی با انرژی قابل قیاس با گاف انرژی و یا بزرگتر از آن بر یک نیم رسانا فرود آید ممکن است توسط الکترون های موجود در نیم رسانا جذب گردد. این مسئله از دید نظریه ساختار نواری در جامدات به منزله تحریک و گسیل یک الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش است (شکل ۷-۱).



شکل ۷-۱ نمایی از تحریک یک الکترون، باز ترکیب ها و انرژی بستگی اکسیتون.

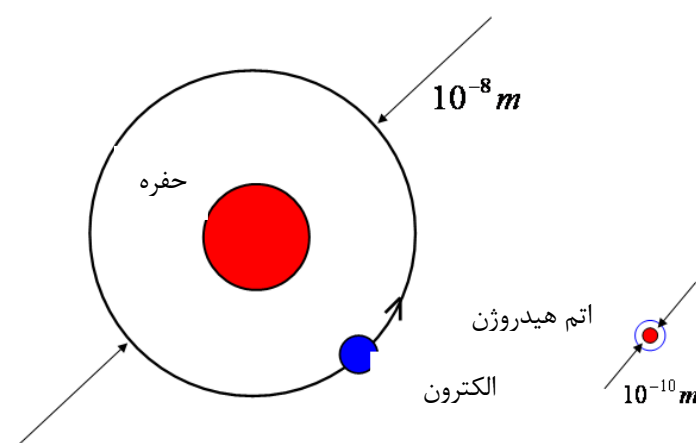
¹ Esaki

² Tsu

³ Excitonic effects

جای خالی الکترون در نوار ظرفیت به عنوان حفره^۱ تعریف می شود. حفره دارای بار مثبت است بنابراین بدلیل جاذبه کولنی می تواند با الکترون در نوار رسانش پیوند برقرار کند. به این جفت الکترون-حفره با همبستگی کولنی^۲ اصطلاحاً اکسیتون گفته می شود. به مقدار انرژی کاهش یافته سیستم در اثر تولید اکسیتون انرژی بستگی اکسیتون (E_B) گفته می شود تمام اکسیتونها نسبت به فرایند نهایی بازترکیب که در آن الکترون به داخل حفره فرو می ریزد ناپایدارند. طول عمر یک سیستم اکسیتونی حدود 10^{-12} تا 10^{-9} ثانیه است.

یک سیستم اکسیتونی شباهت زیادی به اتم هیدروژن دارد (شکل ۸-۱) که علت آن جرم موثر بزرگتر حفره در مقایسه با جرم الکترون است. از این رو می توان مدل اتمی بوهر را برای بررسی خواص سیستم اکسیتونی به کار برد. شعاع اکسیتونی (فاصله نسبی میان الکترون و حفره) نیز به همین دلیل در اکثر مواقع شعاع بوهر اکسیتون^۳ نامیده می شود.



شکل ۸-۰ طرح واره ای برای مقایسه اکسیتون وانیر-مات در مقایسه با اتم هیدروژن. این دو سیستم شعاع بوهر و انرژی بستگی متفاوتی دارند. بر عکس اتمها اکسیتونها طول عمر محدودی دارند.

۱-۳-۱ انواع اکسیتون:

¹ Hole

² Coulomb-correlated electron-hole pair

³ Exciton Bohr radius

اکسیتون ها در بسیاری از مواد بلوری یافت می شوند و معمولا در دو دسته اکسیتون های وانیر-مات^۱ [۷] و اکسیتون های فرنکل^۲ [۹] تقسیم بندی می شوند. اکسیتون های وانیر-مات در نیمرسانا ها دیده می شوند در حالی که اکسیتون های فرنکل در بلورهای نارسا و بلورهای مولکولی تشکیل می شوند. شعاع بوهرا اکسیتون وانیر در قیاس با سلول واحد شبکه بلوری بسیار بزرگتر است. اکسیتون های وانیر می توانند به راحتی درون بلور حرکت کنند و عنوان اکسیتون آزاد هم به همین دلیل به آنها نسبت داده می شود. اکسیتون های فرنکل شعاع بوهرا بسیار کوچکی دارند که در حد سلول واحد اتمی است. این مسئله سبب می شود تا این نوع اکسیتون ها به سختی مقید به اتم ها یا مولکول های خاصی باشند، از این رو این اکسیتون ها را گاهی اکسیتون های تنگ مقید می نامند. حرکت اکسیتون های فرنکل بسیار محدود است و حد اکثر می توانند از یک جایگاه شبکه به جایگاه دیگر جابجا شوند. این اکسیتون تنها زمانی تشکیل می شود که پتانسیل جاذبه ای آنقدر کافی باشد تا از آنها در مقابل برخورد با فونون های شبکه محافظت نماید. از آنجایی که بیشینه انرژی یک فوتون تحریک شده گرمایی در دمای T معادل $K_B T$ است (K_B ثابت بولتزمن) پس فرآیند پایداری اکسیتون تنها زمانی اعتبار دارد که انرژی بستگی آن بزرگتر از $K_B T$ باشد. اکسیتون وانیر انرژی بستگی کوچکی (در حد چند میلی الکترون ولت) دارد که ناشی از شعاع بزرگ آن است. در حالیکه در دمای اتاق مقدار $K_B T$ تقریبا برابر با ۲۵ میلی الکترون ولت می باشد بنابراین اکسیتونهای وانیر در بسیاری از مواد در دمای اتاق قابل مشاهده نیستند. اکسیتون های فرنکل، بر عکس اکسیتون های وانیر، انرژی بستگی بزرگی در حدود 0.1-1eV دارند که این موضوع سبب پایداری آنها در دمای اتاق می شود.

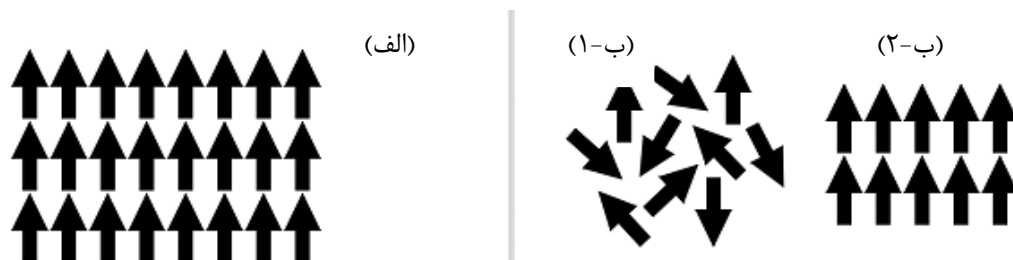
۴-۱ نیمرساناهای مغناطیسی

گشتاور مغناطیسی اتم آزاد دارای سه منشا اساسی اسپین الکترونها، تکانه زاویه ای مداری الکترونها و تغییری که میدان مغناطیسی در گشتاور مداری القا می کند، می باشد. مواد فرومغناطیسی دارای

¹ Wannier-mott excitons

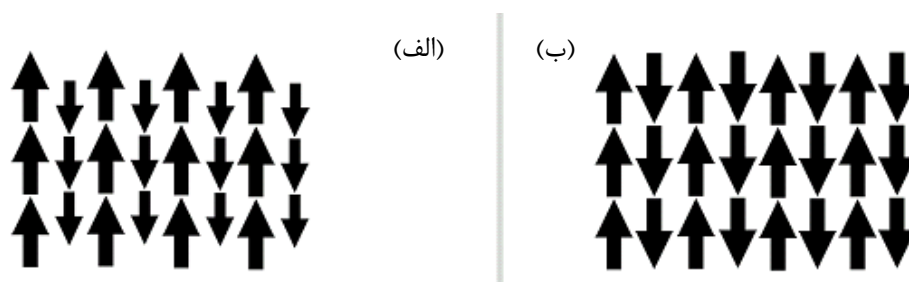
² Frenkel excitons

گشتاور مغناطیسی خودبخودی هستند یعنی اسپین الکترونها و گشتاورهای مغناطیسی در غیاب یک میدان مغناطیسی آرایش منظمی دارند. این نظم که در اثر برهمکنش تبادلی^۱ (فصل ششم این رساله) در مواد ایجاد می شود منجر به پیدایش آهنرباهای دائمی در طبیعت گردیده است.



شکل ۹-۰ طرح واره ای از یک نمونه فرو مغناطیس (الف)، یک نمونه پارامغناطیس در غیاب میدان مغناطیسی خارجی (ب-۱) و یک نمونه پارامغناطیس در حضور میدان مغناطیسی خارجی.

تغییر دما در این مواد باعث افزایش افت و خیز گشتاورها شده و آرایش منظم مغناطیسی را به هم می زند. سرانجام در یک دمای بحرانی یک گذار فرومغناطیس-پارامغناطیس رخ می دهد. این دما را دمای کوری می نامیم. این یک گذار فاز مرتبه دوم است چرا که با افزایش دما خاصیت مغناطیسی ماده بطور پیوسته از حالت فرومغناطیسی به حالت پارامغناطیسی تبدیل می شود. شکل ۱۰-۱ طرح واره ای از یک نمونه فری مغناطیس (الف) و یک نمونه پاد فرو مغناطیس را نشان می دهد.



شکل ۱۰-۱ طرح واره ای یک ماده فری مغناطیس (الف) و یک ماده آنتی فرو مغناطیس

۵-۱ جابجایی دیامغناطیسی

دیامغناطیس از جریانهای القایی توسط میدانها خارجی در پوسته های الکترونی پر شده اتمها ناشی می شود. هر گاه شار در یک مدار الکتریکی تغییر کند یک جریان القایی برقرار می شود که با تغییر

¹ Exchange interaction

شار مخالفت می کند. میدان مغناطیسی القایی در خلاف جهت میدان خارجی است و با آن مخالفت می کند(قانون لنز).گشتاور مغناطیسی مربوط به این جریان یک گشتاور دیامغناطیسی است. برای یک اکسیتون مقید در یک چاه کوانتومی، معمولاً قله طیف فوتولومینسانس تحت تاثیر یک میدان مغناطیسی خارجی به سمت انرژی های بالاتر جابجا می شود. این جابجایی منسوب به جابجایی دیامغناطیسی اکسیتونهای دوبعدی می باشد. جابجایی دیامغناطیسی نشان می دهد که تابع موج یک اکسیتون (اکسیتون حفره سبک یا سنگین و یا اسپین مدار) در فضای حقیقی چروکیده یا گسترده می شود. بنابراین شدت نوسانگر یک اکسیتون با اعمال میدان مغناطیسی افزایش یا کاهش خواهد یافت. محاسبات اکسیتونی برای بررسی این نوع مسائل در بخش دو و سه آورده شده است. در این بخشها از تقریب حفره سنگین استفاده شده است. در کل برای محاسبات دقیق باید از روش k.p برای این محاسبات استفاده کرد. به همین دلیل در فصل ششم این رساله به بررسی روش k.p پرداخته ایم.

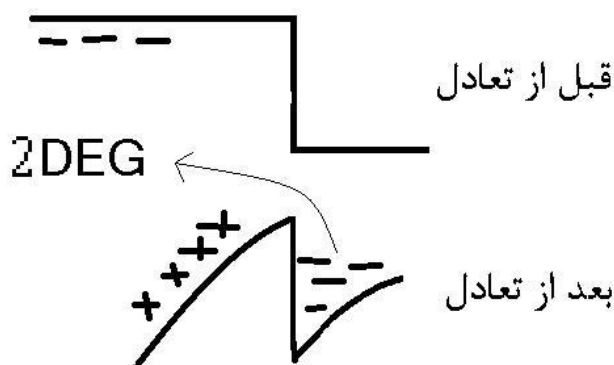
۱-۶ گاز الکترون وحفره دو بعدی

آلایش با ناخالصی های دهنده می تواند باعث کنترل ویژگیهای فیزیکی مواد نیمرساناها شود. البته این کار می تواند باعث شود که بلور مورد بررسی خاصیت دوره ای خود را از دست داده و مراکز پراکندگی افزایش یابند. این موضوع منجر به کاهش تحرک پذیری حاملها می شود و در نتیجه می تواند سرعت قطعه بر پایه نیمرسانا را تغییر دهد. یک روش مناسب برای جلوگیری از کاهش سرعت حامل ها استفاده از روش مدولاسیون آلایش^۱ است. در این حالت آلایش ناخالصی در سد پتانسیل انجام می شود و حاملهای آزاد به درون چاه پتانسیل منتقل می شوند. با این کار فاصله بین حاملهای آزاد و یون های ناخالصی دهنده افزایش می یابد. برای ایجاد فاصله بیشتر از یک لایه آلایش نشده تحت عنوان لایه فضا ساز^۲ استفاده می شود. بنابراین پراکندگی های ناخالصی کاهش و

¹ Doping modulation

² Spaer layer

در نتیجه تحرک پذیری افزایش می یابد. حاملهایی که به داخل چاه ریخته می شوند یک گاز الکترونی دوبعدی^۱ می سازند [۱۰]. این گاز الکترونی دو بعدی از دیدگاه مکانیک کوانتومی، درست مانند یک ذره محبوس در جعبه به فصل مشترک دو محیط وابسته است. این محدودیت در چاه منجر به ایجاد ترازهای انرژی گسسته در راستای محصور سازی می شود.



شکل ۱۱-۰ طرح واره ای از تشکیل گاز الکترون دو بعدی در یک ساختار ناهمگون

انتخاب دقیق ماده و یا ترکیب آلیاژی می تواند منجر به کنترل چگالی گاز حفره دوبعدی شود. سیستم های برپایه گاز الکترون دو بعدی می توانند به تولید الکترونهای با تحرک پذیری بالا از حدود $10^6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ الی $3 \times 10^7 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ بخصوص در دماهای پایین شود [۱۱]. بنابراین مطالعه این گاز می تواند نقش مهمی در تحلیل مسائل مختلفی از جمله مسئله رسانش کوانتومی داشته باشد [۱۲]. این اهمیت از آنجا معلوم می شود که اولین بار اثر کوانتومی هال در سیستم گاز الکترون دوبعدی مشاهده شد و منجر به دو جایزه نوبل در سالهای ۱۹۸۵ [۱۳] و ۱۹۹۸ [۱۴] گردید.

روش تشکیل گاز حفره دو بعدی^۲ نیز مانند آنچه در بالا ذکر گردید می باشد. البته با این تفاوت که بجای آلایش سد پتانسیل با ناخالصی های دهنده از ناخالصی پذیرنده استفاده می شود تا حفره های آزاد ایجاد شده به درون چاه پتانسیل جابجا شوند. از محاسبات ساختار نواری می دانیم که تنها یک نوع الکترون وجود دارد درحالیکه حفره ها می توانند سبک، سنگین و یا شکافتی (به دلیل

^۱ Two dimensional electron gas

^۲ Two dimensional hole gas

برهم کنش اسپین-مدار) باشند. همین امر باعث گردیده تا بررسی یک گاز حفره دو بعدی به مراتب دشوارتر از یک گاز الکترون دو بعدی باشد. بررسی گاز حفره ای در نانوساختار ها باز هم دشوارتر است زیرا در این ساختارها امکان حضور حالات ترکیبی^۱ نیز وجود دارد. در این حالت یک حفره می تواند به عنوان مثال ۲۰ درصد حفره سبک اسپین پایین، ۳۰ درصد حفره سنگین اسپین بالا و ۵۰ درصد حفره شکافتی^۲ پایین باشد.

۷-۱ ساختارهای بررسی شده در این رساله

در این رساله خواص فیزیکی (اپتیکی و مغناطیسی) چاههای کوانتومی یگانه و چندگانه GaN/AlN و GaAs/GaAl_{0.7}As_{0.3} و GaAs/GaAs_{0.7}Sb_{0.3} را مورد بررسی قرار داده ایم. ساختار اول دارای جابجایی نواری بزرگ و دو ساختار بعدی دارای جابجایی نواری کوچکی هستند. البته با کمک تغییر میزان آرایش این مقادارها برای جابجایی نواری تاحدی قابل تغییر است. ساختار نواری و دیگر ویژگیهای ترکیبات حجمی این مواد بطور گسترده ای مورد بررسی قرار گرفته است [۱۵]. علت این انتخاب کاربردهای متنوع این نوع ترکیبات در ساخت قطعات اپتو الکترونیکی و اسپینترونیکی می باشد. این قطعات شامل موجبرهای چاه کوانتومی^۳ [۱۶]، ترانزیستورها [۱۷]، سلولهای خورشیدی [۱۸]، حسگر های نوری^۴ (معمولا در محدوده مادون قرمز) [۱۹-۲۰] و حافظه های مغناطیسی می شوند. برای نیل به این منظور معمولا ویژگی های مختلف نوری و مغناطیسی نانوساختارهای بر پایه این ترکیبات مورد بررسی قرار می گیرند. مطالعه شدت نوسانگر [۲۱]، ضریب شکست [۲۲]، تولید هارمونیک دوم [۲۳]، ضریب جذب [۲۴]، قطبش مغناطیسی و ترابرد وابسته به اسپین^۵ بخشی از ویژگیهایی است که در این زمینه مورد بررسی قرار می گیرند.

¹ Mixed states

² Split off band hole

³ quantum well waveguides

⁴ Infrared detectors

⁵ Spin dependent transport

۸-۱ رهیافتهای محاسباتی

امروزه برای انجام یک پژوهش می توان از رهیافتهای مختلف تجربی، نظری و همچنین محاسباتی که پس از ورود رایانه به عصر جدید فناوری، نگرشی جدید برای بررسی مسائل ایجاد نموده و انجام تحقیقات را به طور شگفت آوری سرعت بخشیده است استفاده کرد. در دنیای فیزیک یک رهیافت محاسباتی بر اساس فصل مشترک های فیزیک نظری، فیزیک تجربی، علوم کامپیوتر و تا حدی شیمی بنا می شود به گونه ای که بسیاری از رهیافتهای محاسباتی قدرتمند مورد استفاده فیزیکدانان در حیطه رهیافتهای شیمی محاسباتی قرار می گیرند. سه نوع نگرش در حل مسائل فیزیک کوانتومی وجود دارد. در نگرش اول، ما به وضوح استفاده مستقیم از هامیلتونی به همراه روش قدرتمند، ولی بسیار دشوار، تابع گرین^۱ را مشاهده می کنیم. توابع گرین به دو دسته مهم توابع گرین کلاسیکی، که در الکترودینامیک [۲۵] دیده می شوند، و توابع گرین کوانتومی، که در کتابهای فیزیک بس ذره ای [۲۶] می توان آنها را یافت، تقسیم می گردند. در نگرش دوم، بیشتر اوقات برای سیستم یک هامیلتونی نوشته می شود و سپس با کمک یک دسته ویژه حالت متعامد^۲ و یا غیر متعامد^۳ سعی در تبدیل هامیلتونی عملگری به هامیلتونی ماتریسی می گردد و سپس با قطری سازی آن، کلید ورود به دنیای کوانتوم یعنی تابع موج سیستم بدست می آید. نگرش سوم استفاده از شبه ذرات است. در نگرش اخیر فرد ترجیح می دهد برای سهولت در انجام محاسبه، برهمکنش ها را بسته بندی کند. به عنوان مثال بجای لحاظ کردن برهمکنش یک الکترون با جرم سکون m_0 در شبکه بلوری، یک فیزیکدان این برهمکنشها را در یک ذره جدید فرضی قرار داده و یک ذره جدید می سازد با جرم موثر^۴ m^* می سازد [۲۷] که یک ذره واقعی نیست ولی تا حد زیادی محاسبات را ساده می کند. این ایده ساده به یک روش بسیار کارآمد به نام تقریب جرم

¹ Green functions

² Orthogonal basis functions

³ Non-Orthogonal basis functions

⁴ Effective mass

موثر^۱ منجر شده است که به طور قابل توجهی مورد استفاده پژوهشگران قرار گرفته است. با کمک این تقریب به همراه تقریب دیگری به نام تقریب تابع پوش^۲، می توان بجای توابع نوسانی سریع بلوخ^۳ در مقیاس اتمی از یک تابع پوش کند تغییر استفاده نمود و بنابراین سرعت محاسبات تاحد زیادی افزایش داد زیرا کار با توابع تند تغییر بلوخ بسیار دشوار است. در مرجع [۲۸] نمونه ای از یک کار مقایسه ای بین این رهیافت و رهیافت پرکاربرد شبه پتانسیل^۴ ارائه شده است. رهیافت پتانسیل کامل^۵ روش دقیقتری است که در نرم افزار wien2K از آن استفاده شده است.^۶ بر خلاف روش شبه پتانسیل، در روش پتانسیل کامل از نوسانات سریع توابع موج اتمی در ناحیه مغزه اتمی صرف نظر نمی شود. به همین دلیل برای رسیدن به دقت دلخواه به محاسبات بیشتری نیاز است. در اصل آشنایی با این تقریبها می تواند راه را برای استفاده از روشهای هیبریدی^۷ هموار نماید. ولی نکته مهم و البته کمی نگران کننده آن است که در این راه، گاهی کوچکترین کارها مستلزم نوشتن صدها و بلکه هزاران خط برنامه است. کد الگوریتم گروههای بازنرمالش ماتریس چگالی دینامیکی^۸ برای بررسی ویژگیهای دینامیکی سیستم های بس ذره ای ابعاد پایین^۹، نظیر تابع طیفی^{۱۰} که در آزمایشاتی نظیر طیف نگاری نورگسیل وابسته به زاویه^{۱۱} با آنها مواجه می شویم [۲۹] نمونه ای از این برنامه نویسیهای چند هزار خطی است. این کد در پروژه الگوریتمها و کتابخانه هایی برای فیزیک محاسباتی (ALPS)^{۱۲} موجود است. البته در این پروژه روی الگوریتمهای دیگری مثل مونت کارلو کوانتومی^{۱۳} و قطری سازی دقیق^{۱۴} هم سرمایه گذاری شده است. یکی از اهداف این رساله هم تولید رهیافت های هیبریدی برای بررسی بعضی از خواص فیزیکی نانوساختارها می باشد که در

¹ Effective mass approximation

² Envelop function approximation

³ Bloch oscillations

⁴ Pseudopotential approximation

⁵ Full potetial

⁶ برای اطلاعات دیگر به منزلگاه این نرم افزار در اینترنت مراجعه کنید.

⁷ Hybrid methods

⁸ Dynamical Density Matrix Reno9rmalization Group (DDMRG)

⁹ Low dimensional many body systems

¹⁰ Spectral function

¹¹ Angle resolved photoemission spectroscopy

¹² ALPS project (Algorithms and Libraries for Physics Simulations), alps.comp-phys.org

¹³ Quantum Monte Carlo

¹⁴ Exact diagonalization

فصل های بعد به طور مبسوط مورد بحث قرار می گیرد. در این رساله نیز ۱۲۰۰۰ خط برنامه ++C روی تعدادی از روشهای محاسباتی نوشته شده است. دلیل تولید روشهای مختلف این است که مسائلی که بطور تحلیلی و کامل قابل حل می باشند زیاد نیستند. به عنوان مثال در فیزیک کلاسیک معمولاً تنها تا مسائل دو ذره ای بطور تحلیلی قابل حل هستند و مسئله های چند ذره ای که از طریق یک پتانسیل با یکدیگر برهمکنش می کنند تنها به شرطی که حل معادله نیوتن، لاگرانژ و یا هامیلتونی به معادلات جفت نشده منجر شود به طور تحلیلی قابل حل می باشند. در مکانیک کوانتومی نیز تعداد پتانسیلهایی که معادله شرودینگر تک ذره ای برای آنها با یک روش تحلیلی قابل حل باشد زیاد نیستند مثل: پتانسیل مربوط به ذره در جعبه، پتانسیل مورس، پتانسیل پوشل-تلر^۱. وقتی تعداد ذرات و یا ابعاد فضا بیشتر شود باز هم مسئله دشوارتر می گردد زیرا آنچه که بعداً باعث دشواری حل یک مسئله می شود افزایش درجات آزادی است. برای مثال اگر یک سیستم N ذره ای در نظر بگیریم که از طریق پتانسیلی نظیر پتانسیل مورس با هم برهمکنش کرده و حرکتی در سه بعد انجام می دهند برای حل معادله نیوتن با $6N$ معادله جفت شده مواجهیم. برای بررسی مسائل بس ذره ای در مکانیک کوانتومی بیشتر اوقات فرضیاتی در نظر گرفته می شود که منجر به جداسازی هامیلتونی مربوط به هر ذره می شود. البته این فرضیات در بسیاری مسائل کارآمد نیستند و در بسیاری از موارد حتی با کمک این فرضها و از طریق کامپیوتر هم نمی شود مسئله مورد نظر را حل نمود. روشهای محاسباتی موجود برای بررسی سیستم های بس ذره ای نیز دارای ایده های مجزا ولی محدودی می باشند. بعضی از این ایده ها خود را در روشهایی مثل نظریه میدان متوسط^۲، نظریه تابعی چگالی^۳، روش گروههای بازبهنجارش^۴، روش قطری سازی دقیق^۵، روش وردشی^۶، روش دینامیک مولکولی^۷ (کلاسیکی و کوانتومی)، روش مونت کارلو^۱،

¹ Poschel-Teller

² Mean field theory

³ Density functional theory

⁴ Renormalization group method

⁵ Exact diagonalization

⁶ Variational method

⁷ Molecular dynamics

الگوریتم ژنتیک^۲، روشهای پیوسته^۳ نشان می دهند. این روشها هرکدام در محدوده زمانی و مکانی خاصی قابل استفاده هستند. معمولا این روشها را بر حسب اینکه حیطه کاربریشان کجاست به دسته های مختلفی تقسیم می کنند. روش ابتدا به ساکن^۴، که بر پایه حل معادله شرودینگر بطور مسقیم استوار می باشند، و همچنین روش شبیه سازی اتم گرایانه کلاسیکی^۵ از آن جمله اند. برای انجام هر محاسبه ابتدا باید محدوده کلاسیکی یا کوانتومی کنترل شود. به عنوان مثال در هنگام استفاده از روشهای عددی (مخصوصا روشهای بر پایه گسسته سازی^۶ فضا) گسترش محدوده انتگرال گیری به داخل منطقه ممنوعه کلاسیکی، برای یافتن ویژه مقادیر و ویژه توابع یک معادله شرودینگر، ممکن است به جوابهای نمایی افزایشی در این مناطق بیانجامد که اشتباه می باشد [۳۰].

در شکل (۱-۱۲) مقایسه ای بین روشهای مختلف موجود برای بررسی سیستم های بس ذره ای در حیطه های زمانی و مکانی مختلف نشان داده شده است. روشهای موجود در شکل (۱-۱۲) اغلب زمانبر هستند بخصوص اگر تعداد ذرات زیاد باشد و یا بخواهیم محاسبات کوانتومی را با دقت زیاد انجام بدهیم. معمولا برای افزایش سرعت محاسبات وقتی که ابررایانه در اختیار نباشد از موازی سازی کامپیوتر ها استفاده می شود که برای همه روشها معمولا به افزایش سرعت قابل توجه نمی انجامد. افزایش سرعت در مواردی از مرتبه ۱/۵ تا ۲ برابر است [۳۱]. میزان افزایش سرعت به میزان قابلیت برنامه نوشته شده برای موازی سازی و الگوریتم موازی سازی استفاده شده، بستگی دارد و در مواردی که تعداد عملیات لازم برای محاسبه از یک میزان بحرانی بیشتر نباشد موازی سازی می تواند باعث کاهش سرعت انجام محاسبات گردد.

¹ Monte Carlo

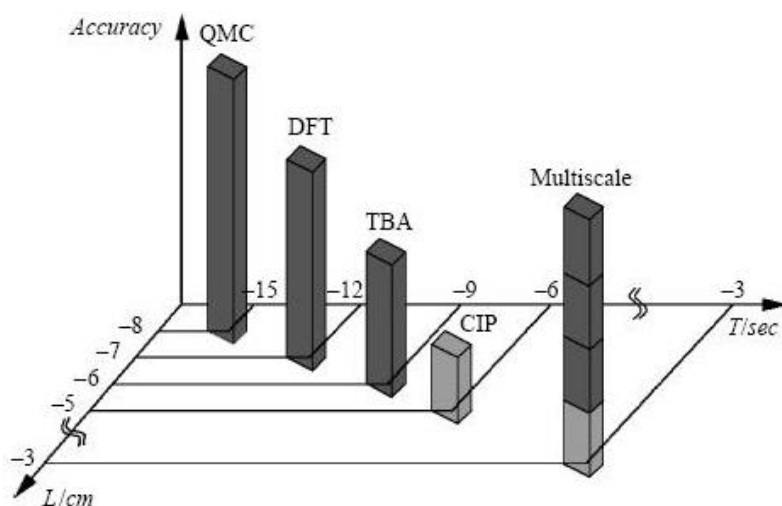
² Genetic algorithm

³ Continuum method

⁴ Ab initio

⁵ Classical Atomistic simulations

⁶ Discretization methods



شکل ۰-۱۲ مقایسه ای بین روشهای مختلف موجود برای بررسی سیستم های بس ذره ای در گستره های زمانی مکانی مختلف. اعداد نشان داده شده روی محور ها باید در توان ۱۰ قرار بگیرند. رهیافتهای مقایسه شده عبارتند از: مونت کارلو کوانتومی (QMC)، نظریه تابعی چگالی (DFT)، تقریب تنگ بست.

در هیبرید کردن روشها بایستی دقت نمود که هر روش ممکن است برای محدوده خاصی از زمان و مکان طراحی شده باشد. استفاده صحیح از دو روش برای ایجاد یک روش هیبریدی منوط به بر آورده شدن شرایط خاصی است که در همه حال محقق نمی شود. ایجاد روشهایی کارآمد برای حل مسائل بس ذره ای به منظور رسیدن به حد ترمودینامیکی (تعداد اتمهای به اندازه کافی بالا که در روابط ترمودینامیکی صادق باشند) هنوز چالش برانگیز است. با اطلاعات کنونی هنوز بررسی کامل حضور یک ناخالصی در یک زنجیره یک بعدی از اتم ها شامل ۱۰۰ اتم که درجه آزادی فرمیونی و اسپینی دارند بطور کامل حل نشده است.

با توجه به همه این مسائل، در این رساله تلاش کرده ایم تا گامی در راستای توسعه روشهای محاسباتی موثر و سریع، بدون استفاده از روشهای موازی سازی، برای بررسی خواص ترکیبات نیمرسانای نانوساختار برداریم. در این کار ایده اصلی برای ایجاد روشهای محاسباتی جدید، ترکیب روشهای مختلف محاسباتی برای بهره برداری از قدرت آنها بطور یکجا بوده است. بطور مثال روش ترکیبی ژنتیک-مونت کارلو-وردشی^۱ (GMV) و یا روش ترکیبی ژنتیک-مونت کارلو-وردشی

¹ Genetic-Monte Carlo-Variational (GMV)

متمایل (BGMV)^۱ نمونه هایی از این رهیافتهای می باشند که در فصل دوم بطور مبسوط معرفی شده اند. همچنین توصیف مختصری برای تعدادی از روشهای مورد استفاده در این رساله در ادامه آورده شده است و بقیه روشهای مورد استفاده در فصلهای مربوطه توضیح داده شده اند.

۱-۸-۱ روش مرز عبوری کوانتومی

روش مرز عبوری کوانتومی در ابتدا توسط کیرک^۲ و لنت^۳ برای بررسی موجبرهای الکترونی^۴ تولید شد [۱۹۵] و سپس توسط فرنسلی^۵ برای بررسی قطعات تونلی ساختار ناهمگون^۶ مورد استفاده قرار گرفت [۱۹۶]. روش مرز عبوری کوانتومی یک روش پایه موضعی است که برای مدل‌های تنگ بست و مدل‌های بر پایه موج تخت مفید است. نکته کلیدی در این روش شرایط مرزی عبوری کوانتومی است. این روش، روندی برای حل دستگاه معادلات خطی ارائه نمی کند بلکه مسئله فیزیکی را به تعدادی معادلات ریاضی که توسط توابع کتابخانه ای قابل حل است تبدیل می کند. روش مرز عبوری کوانتومی دارای مزایای زیر است:

الف: سادگی. برنامه نویسی کامپیوتری این روش خیلی پیچیده نیست. معادلات اولیه این روش تنها شامل معادله شرودینگر جرم موثر در شکل‌های تنگ بست و یا اجزای محدود برای منطقه فعال بعلاوه جفت معادلات شرایط مرزی که شرط مرزی پراکندگی را عنوان می کنند می باشد. ب: پایداری عددی. این روش قدرت انتخاب کارآمدترین و پایدارترین الگوریتم را می دهد.

ج: کارآمدی عددی. ماتریس تولید شده در این روش شدیداً اسپارس است و این به کارآمدی این روش می افزاید.

¹ Biased Genetic-Monte Carlo-Variational(BGMV)

² Kirkner

³ Lent

⁴ electron waveguide

⁵ Frensley

⁶ heterostructure tunnel devices

۱-۸-۲ روش K.P

معادله شرودینگر را برای یک سیستم دوره ای می توان به شکل زیر نوشت [۱۹۲]:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(r) \right] \psi_{nK}(r) = \varepsilon_n \psi_{nK}(r) \quad (۱-۱)$$

$$\psi_{nK}(r) = e^{iK \cdot r} u_{nK}(r) \quad (۲-۱)$$

این معادله را می توان بصورت زیر نیز نوشت:

$$H_K u_{nK}(r) = \varepsilon_n(K) u_{nK}(r) \quad (۳-۱)$$

که در آن:

$$H_K = \frac{\hbar^2}{2m} (-i \nabla + k)^2 + U(r) = \frac{1}{2m} (P^2 + 2\hbar K \cdot P + K^2) + U(r) \quad (۴-۱)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(r) + \frac{\hbar}{m} (K \cdot P) \right] u_{nK}(r) = \left[\varepsilon_n(K) - \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \right] u_{nK}(r) \quad (۵-۱)$$

$$\left[H_0 + \frac{\hbar}{m} (K \cdot P) \right] u_{nK}(r) = \varepsilon'_n(K) u_{nK}(r) \quad (۶-۱)$$

جمله $\frac{\hbar}{m} (K \cdot P)$ در روابط فوق بصورت یک اختلال در نظر گرفته می شود. توابع $u_{nK}(r)$ بصورت

زیر بسط داده می شوند:

$$u_{nK}(r) = \sum_{n'} C_{n'}^m(K) u_{n'0}(r) \quad (۷-۱)$$

با قرار دادن رابطه (۷-۱) در (۶-۱) داریم:

$$\sum_{n'} \left\{ [\varepsilon_n(0) - \varepsilon'_n(K)] \delta_{nn'} + \left\langle u_{n0} \left| \frac{\hbar}{m} (K \cdot P) \right| u_{n'0} \right\rangle \right\} C_{n'}^n(K) = 0 \quad (۸-۱)$$

برای نوار ظرفیت نیم رساناها، تقریب اول تصحیح به شکل زیر خواهد بود:

$$|u_v(K)\rangle = |u_v(0)\rangle + \sum_{n' \neq J} \frac{\left\langle u_v(0) \left| \frac{\hbar}{m} (K \cdot P) \right| u_{n'}(0) \right\rangle}{E_v(0) - E_{n'}(0)} |u_{n'}(0)\rangle \quad (۹-۱)$$

و درایه های ماتریس مرتبه یک به شکل زیر است:

$$H_{v,v'}^{(1)} \equiv E_v(0)\delta_{v,v'} + \sum_{n' \neq J} \frac{\left\langle u_v(0) \left| \frac{\hbar}{m} (K.P) \right| u_{n'}(0) \right\rangle \left\langle u_{n'}(0) \left| \frac{\hbar}{m} (K.P) \right| u_{v'}(0) \right\rangle}{E_v(0) - E_{n'}(0)} \quad (10-1)$$

در پایه $|j, m_j\rangle$ با $l=0,1$ و $S=1/2$ داریم:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= |3/2, 3/2\rangle \\ \phi_2 &= |3/2, 1/2\rangle \\ \phi_3 &= |3/2, -1/2\rangle \\ \phi_4 &= |3/2, -3/2\rangle \\ \phi_5 &= |1/2, 1/2\rangle \\ \phi_6 &= |1/2, -1/2\rangle \end{aligned} \quad (11-1)$$

$$H = \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^\dagger & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^\dagger & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^\dagger & S^\dagger & P+Q & \sqrt{2}R^\dagger & -\frac{1}{\sqrt{2}}S^\dagger \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^\dagger & \sqrt{\frac{3}{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \quad (12-1)$$

در ماتریس (۱۲-۱) پارامترهای P و Q و R و S با مجموعه روابط زیر تعریف می شوند:

$$\begin{aligned} P &= \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ Q &= \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) k_z \\ R &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(-\sqrt{3} \gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + i 2\sqrt{3} \gamma_3 k_x k_y \right) \\ S &= \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} \sqrt{3} (k_x^2 - i k_y^2) \end{aligned} \quad (13-1)$$

دراین رابطه پارامترهای γ پارامترهای کوهن-لوتینگر^۱ نامیده می شوند.

¹ Kohn-Luttinger

فصل ۲: معرفی الگوریتم ژنتیک و

استفاده از آن برای بررسی جابجایی

دیامغناطیسی و رفتار اکسیتون های مقید

در چاههای کوانتومی

, $\text{GaAs}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}/\text{GaAs}$

$\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$

۲-۱ معرفی الگوریتم ژنتیک

ایده اولیه طرح الگوریتم ژنتیک توجه به این اصل است که طبیعت مناسب ترین‌ها^۱ و نه بهترین‌ها را انتخاب می‌کند. ملاک مناسب بودن توسط یک تابع بهینگی^۲ تعریف می‌شود. این ایده اولین بار توسط داروین بیان گردید [۳۲]. الگوریتم ژنتیک در اصل مکانیزمی برای شبیه سازی انتخاب طبیعی^۳ داروین است. با ارائه نظریه محاسبات تکاملی توسط ریچنبرگ در سال ۱۹۶۰ باب حل مسائل ریاضی با این روش باز گردید [۳۳-۳۴]. سپس هالاند^۴ در سال ۱۹۷۵ اولین الگوریتم ژنتیک را مورد استفاده قرار داد [۳۵] ولی شکل امروزی الگوریتم ژنتیک توسط گولدبرگ^۵ ارائه گردید [۳۶].

یک الگوریتم ژنتیک دارای ویژگیهایی است که بعضی از آنها عبارتند از:

- ۱- جوابهای الگوریتم ژنتیک بهینه هستند ولی الزاما بهترین جواب نیستند.
- ۲- الگوریتمهای ژنتیک با کد گذاری جوابها و نه خود جوابها کار می‌کنند.
- ۳- الگوریتمهای ژنتیک مجموعه ای از جوابها و نه تنها یک جواب خاص را می‌توانند جستجو کنند.
- ۴- اعمال مورد استفاده در روش ژنتیک نسبت به روشهایی مانند مونت کارلو، دینامیک مولکولی سریعتر هستند.
- ۵- الگوریتمهای ژنتیک از خطر افتادن در نقاط کمینه موضعی^۶ و یا بهینه موضعی^۷ در امانند چرا که حتی ضعیفترین عناصر هم شانس انتخاب دارند.

¹ Fittest

² Fitness function

³ Natural Selection

⁴ Holland

⁵ Goldberg

⁶ Local minima

⁷ Local optimum

۶- الگوریتمهای ژنتیک نیاز به ریاضیات پیچیده ندارند مگر اینگه ماهیت مسئله پیچیده باشد.

علت آن است که قرار نیست از سوال به جواب برسیم بلکه مسئله هر قدر هم دشوار باشد

جوابی برای آن حدس می زنیم و این جواب را بهینه می کنیم.

بعضی از کاربردهای الگوریتم ژنتیک عبارتند از:

شبیه سازی رشد بلور^۱ [۳۷-۳۸]، کنترل آشوب^۲ در تولید سیگنالهای دوره ای [۳۹]، یافتن تابع

پارش^۳ [۴۰]، پارامتر یابی میادین نیرو^۴ [۴۱]، بهینه سازی و تعیین ساختار بهینه مواد^۵ [۴۲]-

[۴۳]، تعیین ساختار ماده از روی اطلاعات پراش پودری^۶ [۴۴]، حل معادلات دیفرانسیل [۴۵]،

بررسی خواص فیزیکی نانو ساختارها [۴۶-۴۷]، قطری سازی هامیلتونی ها^۷ [۴۸]، حل معادله

شرودینگر^۸ [۴۹-۵۰].

برخی از الگوریتم های ژنتیک موجود برای بررسی های بالا عبارتند از:

الگوریتم ژنتیک دودویی^۹، الگوریتم ژنتیک عملی^{۱۰}، الگوریتم ژنتیک اصول اولیه^{۱۱}، الگوریتم ژنتیک

تنگ بسط^{۱۲}، الگوریتم ژنتیک ترکیب شده با نظریه تابع چگالی^{۱۳}، الگوریتم ژنتیک ترکیب شده با

شبکه های عصبی^{۱۴}، الگوریتم ژنتیک کد حقیقی^{۱۵}.

۲-۱-۱ ساختار الگوریتم ژنتیک

یک الگوریتم ژنتیک از سه بخش اساسی زیر تشکیل شده است:

¹ Crystal growth

² Chaos Controlling

³ Partition function evaluation

⁴ Force fields parameterization

⁵ Structure optimization

⁶ Powder diffraction data

⁷ Hamiltonian Diagonalization

⁸ Schrödinger equations solution

⁹ Binary GA

¹⁰ Empirical GA

¹¹ Ab initio GA

¹² Tight binding GA

¹³ Density functional GA

¹⁴ Neural networks

¹⁵ Real code GA

۱- راهی برای انتخاب والدین

۲- راهی برای تولید فرزندان از روی والدین

۳- مکانیزمی برای انتخاب بهترینها (فرزندان لزوماً از والدین بهتر نیستند!)

برای حل یک مسئله به روش الگوریتم ژنتیک باید به طریقی یک معادل برای مفاهیم موجود در الگوریتم ژنتیک بدست آورد. این مفاهیم عبارتند از: ژن، که واحد پایه ژنتیک است، فرم^۱ که حالات مختلفی است که هر ژن می تواند بگیرد و کروموزوم^۲ یا ژنوم که به گروهی از ژنها گفته می شود. اصول اولیه یک الگوریتم ژنتیک عبارتند از: برآورد^۳، گذار^۴، کد گذاری^۵ جهش^۶، کد گذاری روشی برای تولید نمایشی از جوابها بصورت رشته های کروموزومی یا بیتی (دودویی) است. برای مثال هنگام کار با اعداد (با طول رشته ۴) می توان از شکل دودویی آنها استفاده کرد:

عدد ۱۳ به فرم دودویی = ۱۱۰۱

عدد ۹ به فرم دودویی = ۱۰۰۱

بخش کدگذاری دشوارترین بخش الگوریتم ژنتیک است. روش دوم برای کدگذاری استفاده از آرایه ای از اعداد صحیح یا اعشاری است. روش سوم می تواند استفاده از رشته ای از حروف باشد. جمعیت اولیه مفهوم دیگری است که از کنار هم گذاشتن جوابهای مختلف ممکن که در ابتدا بصورت تصادفی تولید می شوند حاصل می شود. در مرحله برآورد بایستی یک تابع معیار بهتر بودن یا نبودن^۷ بیابیم تا بتوانیم از میان جمعیت اولیه بهترین ها را انتخاب کنیم و اجازه دهیم زنده بمانند! روشهای مختلف انتخاب عبارتند از نخبه گزینی^۸، رولت^۹ (فرد با برآزش بیشتر)، مقیاس بندی^{۱۰} (این روش زمانی روش مناسبتری می شود که فقط تفاوت های کوچکی در میزان برآزشها

¹ Allele

² Chromosome

³ Evaluation

⁴ Crossover

⁵ Encoding

⁶ Mutation

⁷ Fitness

⁸ Elitist

⁹ Roulette

¹⁰ Scaling

وجود داشته باشد). بعضی روشهای انتخاب دیگر عبارتند از: انتخاب مسابقه‌ای^۱، سلسله مراتبی^۲، حالت پایا^۳، رتبه^۴.

برای تولید نسلهای جدید بایستی تغییراتی روی نسلهای قدیمی انجام دهیم تا بتوان نسلهای جدید را ساخت. به این عمل گذار می‌گوییم. این عمل تنها با احتمال خاصی (بین ۰/۶ تا ۱) در سیستم رخ می‌دهد و به دو گذار تک نقطه‌ای و دو نقطه‌ای تقسیم می‌شود. مثلاً در حالت تک نقطه‌ای، یک نقطه بین صفر تا طول رشته دودویی انتخاب می‌شود و دو کروموزوم پدر و مادر هر کدام به دو قسمت تقسیم می‌شوند. اکنون ۴ قسمت داریم که با کنار هم قرار دادن آنها (یکی از پدر و یکی از مادر) کروموزومهای فرزند تولید می‌شوند. جهش هم به معنی سیر غیرطبیعی است. در کروموزوم انتخابی یک نقطه بطور تصادفی انتخاب می‌شود و فرم آن تغییر می‌کند. ایده کار این است که گونه‌های تکامل یافته تر صرفاً حاصل تکامل تدریجی گونه‌های قبلی هستند. هدف از عمل جهش، تولید ژنهایی است که در جامعه اولیه حضور ندارند. لیکن باید توجه داشت که با جهش کم ژنهای زیادی که ممکن بود مفید باشند بوجود نمی‌آیند. از سوی دیگر افزایش جهش باعث افزایش اغتشاش خواهد شد و در نتیجه فرزندان ویژگیهای والدین را از دست می‌دهند.

شرط خاتمه یک الگوریتم ژنتیک می‌تواند یکی از موارد زیر باشد:

۱- به تعداد ثابتی از نسل‌ها برسیم.

۲- زمان اختصاص داده شده پایان یابد.

۳- یک فرد (فرزند تولید شده) پیدا شود که کمترین ملاک را برآورده کند.

۴- بیشترین درجه برآزش فرزندان حاصل شود، یا دیگر نتایج بهتری حاصل نشود.

۵- بازرسی دستی انجام شود.

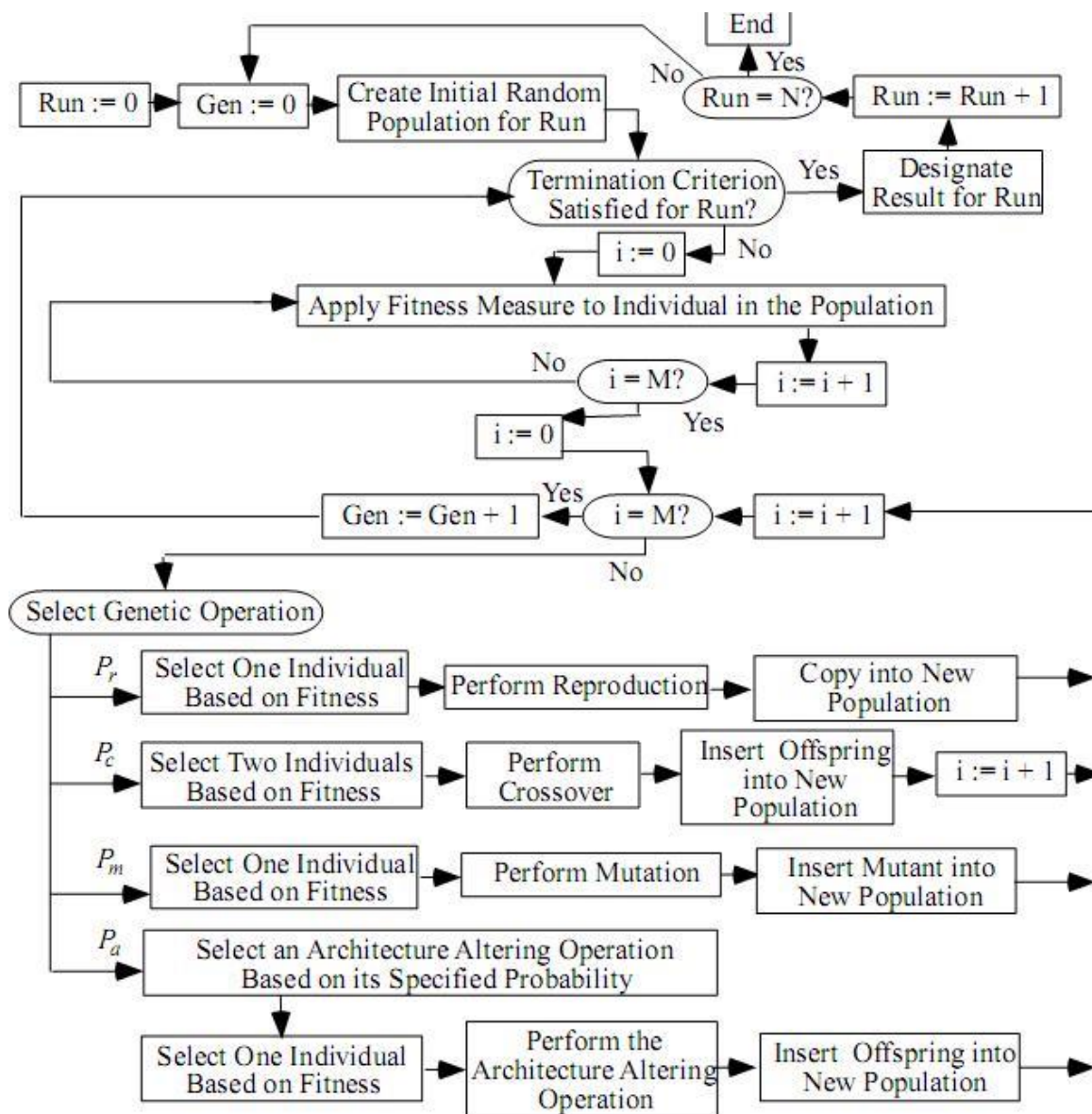
۶- ترکیبی از حالات بالا استفاده شود.

¹ Tournament

² Hierarchical

³ Steady-State

⁴ Rank



شکل ۱-۱ الگوریتم محاسباتی ژنتیک

مراحل اجرایی یک الگوریتم کلی ژنتیک عبارتند از:

- ۱- شروع الگوریتم با یک جمعیت n تایی با طول یکسان
- ۲- محاسبه بهینگی هر فرد
- ۳- انتخاب دو فرد با بهینگی بالا (والدین)
- ۴- اعمال گذار و تولید فرزندان از روی والدین (با احتمال اتصال بین ۰,۶ و ۱)
- ۵- اعمال جهش با احتمال p (در حدود ۰,۰۱ یا کمتر)
- ۶- قرار دادن فرزندان داخل یک مجموعه به عنوان نسل جدید

۷- تغییر دادن جمعیت اولیه با ورود نسل جدید

۸- رفتن به گام ۲

مراحل اجرایی یک الگوریتم محاسباتی ژنتیک در شکل ۲-۱ آمده است.

۲-۱-۲ کاربرد الگوریتم ژنتیک

بواسطه وجود ناهمسانگردی در یک ترکیب نانوساختار، این ساختارها ویژگی های یگانه ای دارند که در مواد حجمی این خواص مشاهده نمی شوند. این امر باعث گردیده است تا علیرغم دشوار بودن تهیه و رشد نانوساختارها همچنان توجه ویژه ای به مطالعه آنها وجود داشته باشد. به منظور اطلاع از ویژگیهای این مواد، روشهای نظری و عددی زیادی برای بررسی ویژگیهای آنها ارائه شده است. تعدادی از این روشها عبارتند از: تفاضل محدود حوزه زمان^۱ [۵۱]، روش گام تصادفی^۲ [۵۲]، الگوریتم ژنتیک [۵۳-۵۶]، گروههای بازبهنجارش ماتریس چگالی^۳ [۵۷]، محاسبات وردشی [۵۸-۶۱]، اختلال [۶۲]، مونت کارلو [۶۳]، روش سریهای توانی [۱۰]، و حل دقیق^۴ [۶۴-۶۵].

کاربردهای قبلی روش ژنتیک در مطالعه چاه های کوانتومی قبل منجر به بررسی خواصی نظیر: کنترل کوانتومی حرکت بسته های موج در چاههای کوانتومی [۶۶]، تحلیل داده های تجربی طیف فوتولومینسانس برای یافتن انرژی فعال سازی پخش بطور مستقیم [۶۷]، تعیین پارامترهای بهینه سیستم چاه کوانتومی GaAs برای کارایی بهتر در فرکانسهای بالا [۶۸] شده است. در مطالعه نقاط کوانتومی مواردی نظیر محاسبه گاف نواری آرایه ای از نقاط کوانتومی [۶۹]، یافتن ضرایب جذب اپتیکی خطی و غیر خطی و انرژی بستگی نقاط کوانتومی [۷۰] بررسی شده اند. این روش برای مطالعه نانو ذرات [۷۱-۷۲] و نانوسیمها [۴۳-۷۴] و بیشتر از همه با کار پیشگامانه گرون دیون و همکاران [۷۵] برای مطالعه نانوخوشه ها [۷۶-۷۸] نیز مورد استفاده قرار گرفته است. در این کار ساختار نانو خوشه های جذب شده در فرایند رشد روی یک سطح و شرایط رسیدن به

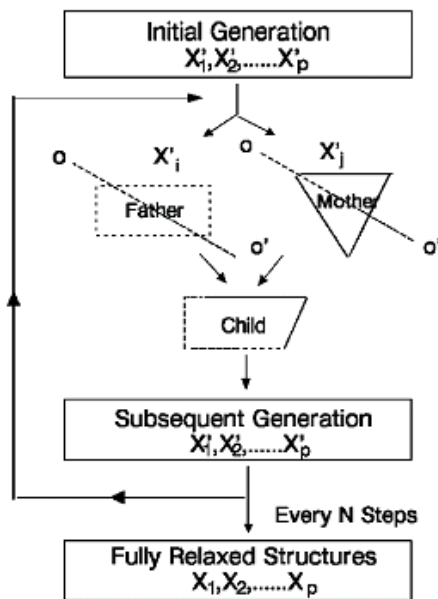
^۱ Finite-difference time-domain method

^۲ Random walk

^۳ Density matrix renormalization group

^۴ Exact solution

ساختار حالت پایه با کمترین انرژی بررسی می شود که نمودار گردش آن در شکل (۲-۲) نشان داده شده است.



شکل ۲-۱ مراحل الگوریتم ژنتیک مورد استفاده توسط گروه دیون برای محاسبه ساختار حالت پایه نانوخوشه ها [۲۶]

در بعضی مواقع الگوریتم ژنتیک با روشهای دیگری مانند روشهای شبکه های عصبی [۷۹] و نظریه تابع چگالی [۸۰] بصورت هیبریدی مورد استفاده قرار می گیرد.

در مطالعه نانوسیمها این الگوریتم بیشتر برای بررسی ریخت شناسی^۱ آنها به کار رفته است که فرایند رشد را شبیه سازی می کند [۷۴]. شکل (۲-۳) ریخت شناسی تعدادی از نانوسیمهای طلا که توسط گروه ونگ و به کمک الگوریتم ژنتیک بررسی شده است را نشان می دهد.

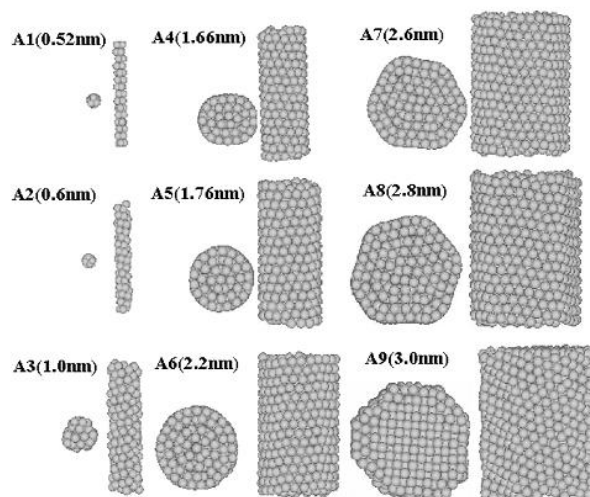
در این رساله نیز روشی جدید برای شبیه سازی عددی و بررسی خواص نانوساختارهای یک و دو بعدی بر پایه الگوریتم ژنتیک ارائه شده است. هدف ما در این کار ترکیب قدرت جستجوی جهانی^۲ و چند هدفی^۳ الگوریتم ژنتیک، انعطاف پذیری و سرعت روش انتگرال گیری مونت کارلو، سادگی و در عین حال دقت روش حساب وردشی برای رسیدن به یک روش بهینه بوده است. برای این منظور نظیر تمام روشهای محاسباتی دیگر با مشکلات و کاستی هایی روبرو هستیم که در ادامه، راه حل

¹ Morphology

² Global search

³ Multi-objective

هایی برای آنها ارائه شده است. مهمترین ویژگی های این روش سهولت برنامه نویسی، انعطاف پذیری و قابلیت کاربرد برای مسائل مختلف با شکل پتانسیل ها و شرایط مرزی متفاوت و همچنین قدرت جستجوی جهانی آن است.



شکل ۳-۱ ریخت شناسی تعدادی از نانوسیمهای طلا که توسط گروه ونگ بررسی شده است [۷۴]

یک ویژگی قابل توجه در الگوریتم ژنتیک آن است که تنها می بایست تعدادی جواب را که کاندیدای خوبی برای مسئله هستند تولید و از بین آنها بهترین را انتخاب نمود. این کار باعث می شود که در بررسی مسائلی نظیر ساختارهای کوانتومی و حل معادله شرودینگر با افزایش پیچیدگی پتانسیل، پیچیدگی بیشتری به الگوریتم اضافه نشود. در بررسی این مسائل ابتدا یک برنامه برای یک نوع پتانسیل نوشته می شود و سپس یک جواب آزمون با تعدادی پارامتر آزاد انتخاب شده و سپس مسئله کمینه یا بیشینه سازی انجام می شود.

۲-۲ رهیافت بررسی اکسیتون های مقید در چاه های کوانتومی

۲-۲-۱ چاه کوانتومی یگانه $\text{GaAs}/\text{GaAs}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}$

پایه اولیه کار در این بررسی همان اصل ساده وردشی است که با کمک آن می توان انرژی حالت پایه یک سیستم را تخمین زد. در این روش یک تابع موج اولیه بهنجار انتخاب می شود و سپس به کمک رابطه زیر انرژی حالت پایه بدست می آید:

$$E_0 = \min \int \psi^* H \psi dr \quad (1-2)$$

برای بررسی جابجایی دیامغناطیسی ساختار چاه کوانتومی یگانه GaAs/GaAs_{0.7}Sb_{0.3}، در حضور میدان مغناطیسی از الگوریتم ژنتیک استفاده شده است. به منظور محاسبه جابجایی دیامغناطیسی در یک چاه کوانتومی در حضور میدان مغناطیسی عرضی از هامیلتونی مورد استفاده توسط گروه سنگر و همکارانش [۸۱] استفاده شده است:

$$H = \sum_{i=e,h} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} + V_i^{conf}(z_i) \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} + \frac{1}{8} \mu \omega_c^2 \rho^2 \quad (2-2)$$

در این رابطه جرم کاهش یافته از رابطه $\mu = (1/m_e + (\gamma_1 + \gamma_2)/m_0)$ تعیین می شود. همچنین γ_1 و γ_2 پارامترهای نوار کوهن-لوتینگر هستند که با کمک آنها جرم های حفره سنگین در راستای Z و صفحه عمود بر آن به کمک روابط $m_h^{(z)} = m_0/(\gamma_1 - 2\gamma_2)$ و $m_h^{(1)} = m_0/(\gamma_1 + \gamma_2)$ بر حسب جرم الکترون آزاد (m_0) تعیین می شود. همچنین ρ بصورت $\rho = \rho_e - \rho_h$ تعریف می شود. ρ_e و ρ_h به ترتیب مختصات سمتی الکترون و حفره در دستگاه استوانه ای هستند. ω_c فرکانس سیلکلوترونی است که از رابطه $\omega_c = eB/m_0c$ بدست می آید. تابع آزمون برای این هامیلتونی به شکل زیر انتخاب شده است:

$$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = f_e(z_e) f_h(z_h) \exp(-\lambda \sqrt{\rho^2 + a^2(z_e - z_h)^2}) \times \exp(-b^2 \rho^2) \quad (3-2)$$

که در آن $f_i(z_{i=e,h})$ توابع پوش و پارامترهای λ و a و b پارامترهای آزاد این تابع آزمون هستند که باید از طریق کمینه کردن تابع $E_0(B) = \min_{a,b,\lambda} \langle \psi | H | \psi \rangle$ بدست آیند. سپس مقدار جابجایی دیامغناطیسی از طریق $\delta = E_0(B) - E_0(B=0)$ تعیین می شود.

حل تحلیلی معادله (۱-۲) به دلیل جفت شدگی درجات آزادی الکترون و حفره در راستای محور z دشوار است به همین دلیل در بیشتر موارد برای حل این معادله از روش قدرتمند حساب وردشی استفاده می شود [۸۲-۸۳]. با کمک اصل وردشی می توان انرژی حالت پایه یک سیستم را تخمین

زد ($E_0 = \min \int \psi^* H \psi dr$). اکنون انرژی بستگی اکسیتون (E_b) را می توان با کمک رابطه زیر بدست آورد [۸۴]:

$$E_b = E_g + E_e + E_h - E_{ex} \quad (۴-۲)$$

در این رابطه E_g شکاف انرژی انرژی، E_e و E_h به ترتیب انرژی های تک ذره ای الکترون و حفره هستند که از حل معادلات زیر بدست می آیند [۸۵]:

$$\left[\frac{E_e}{V_e} \right]^{1/2} = \cos \left[\left[\frac{m_e E_e}{2\hbar^2} \right]^{1/2} L \right], \quad \left[\frac{E_h}{V_h} \right]^{1/2} = \cos \left[\left[\frac{m_h E_h}{2\hbar^2} \right]^{1/2} L \right] \quad (۵-۲)$$

این معادلات را با کمک الگوریتم نصف کردن حل کرده [۸۶] و از شرایط مرزی بن-دانیل-دوک^۱ به دلیل تفاوت جرم های الکترون و حفره در سد و چاه استفاده کرده ایم [۸۷]. همچنین جرم موثر در چاه کوانتومی با کمک قانون وگارد^۲ برای درصد آرایش آنتیموان ۳۰٪ بدست آمده است [۸۸]. در اینجا لازم است اشاره کنیم که میزان دقت روش وردشی تا حد زیادی به تعداد پارامترهای مورد استفاده بستگی دارد. البته هرچه تعداد این پارامترها بیشتر باشد تعیین آنها نیازمند صرف زمان بیشتری است. برای رفع این مشکل ما از روش الگوریتم ژنتیک استفاده کرده ایم که برخلاف روشهای دیگر کمینه سازی، قابلیت جستجوی تعداد زیادی متغیر و همچنین قابلیت یافتن همزمان کمینه های جهانی و موضعی را دارد. روش بکار برده شده توسط ما در این مطالعه زیرمجموعه روش الگوریتم ژنتیک کد حقیقی^۳ می باشد زیرا ما از مبنای دودویی استفاده نکرده ایم.

فرایند انجام محاسبات به این صورت است که در ابتدا تعدادی موجود (پارامترهایی که قرار است بهینه شوند تا کمینه تابع مورد نظر بدست آید = N) بصورت کاملاً تصادفی تولید می شوند. تابع $E_0(B)$ همان تابع بهینگی است که نشان می دهد یکی از اعضای یک نسل تا چه میزان از دیگران بهتر است و آیا باید در هنگام تولید نسل بعد زنده بماند یا خیر. مقدار این تابع را برای تمام اعضای

¹ Ben-Daniel-Duke

² Vegard law

³ Real code genetic algorithm

نسل اول با کمک انتگرال مونت کارلو^۱ محاسبه می کنیم. این اعضا برحسب مقادیر تابع بهیپنگی مرتب می شوند. نصف دیگر حالات با مقدار تابع بهیپنگی کمتر نگه داشته می شوند و به همان اندازه تعدادی حالت جدید از روی این حالات قدیمی تولید می شوند. روش تولید اعضای جدید همان اعمال جهش و گذار است یعنی جابجایی مقدار اعضا (با یک خط برش) و تولید تصادفی یک عضو جدید با یک احتمال معین p . سپس انرژی نسل جدید محاسبه می شود و اعضا برحسب تابع بهیپنگی مرتب می شوند و نسل قدیم و جدید بر حسب تابع بهیپنگی طوری ادغام می شوند که نسل نهایی، مرکب از نسل قدیم و جدید، از انرژی کم به زیاد مرتب شوند. حال این حلقه آنقدر تکرار می شود تا پارامترهای بهینه بدست آیند.

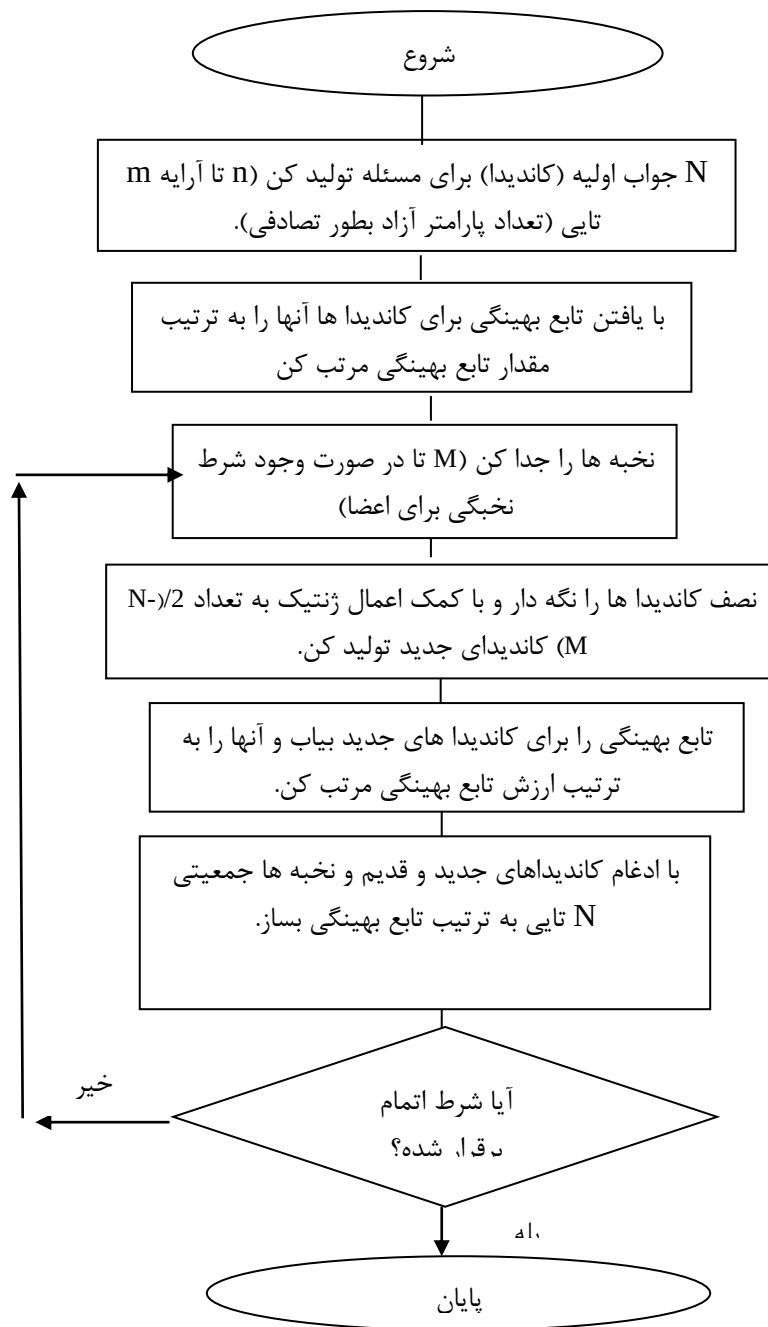
در نظر گرفتن یک حد بالا و پایین (مثبت و منفی) برای پارامترها از ناپایداری برنامه جلوگیری می کند. بزرگتر کردن این گستره ممکن است به حل سریعتر مسئله کمک کند زیرا گستره بزرگتری از اعداد را مورد جستجو قرار می دهد. شرط اتمام شبیه سازی هم می تواند متفاوت باشد مثلاً اینکه انرژی حالت پایه دیگر تغییر چندانی نکند و یا اینکه از ابتدا تعداد خاصی نسل برای تولید در نظر گرفته شود. پارامترهای ورودی در جدول (۱-۲) گزارش شده اند. در این جدول m_e جرم الکترون در نوار رسانش بر حسب جرم الکترون آزاد (m_0) و ϵ ثابت دی الکتریک می باشند.

جدول ۱-۲: پارامترهای استفاده شده در این مطالعه.

ماده	m_e/m_0	γ_1	γ_2	ϵ
GaAs	۰/۰۶۷	۶/۹۸	۲/۰۶	۱۲/۵
GaSb	۰/۰۴۳	۱۳/۴	۴/۷	۱۵/۷

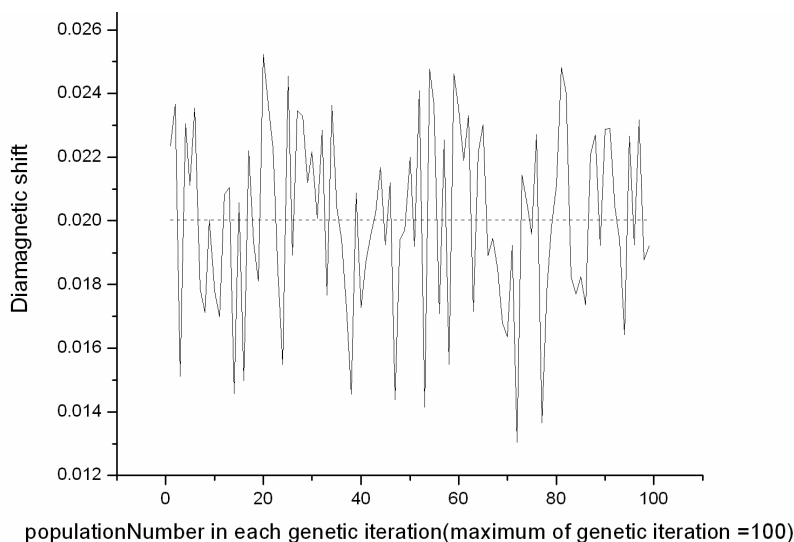
در شکل (۲-۴) نیز نمودار گردشی مورد استفاده در این مطالعه نشان داده شده است. اعمال الگوریتم ژنتیک برای یافتن بهترین پارامترهای ورودی [۸۹]، تعداد تکرار حلقه ژنتیک [۹۰-۹۱] و احتمالهای جهش و گذار بهینه [۹۲-۹۵] تا کنون چندین بار انجام شده است.

¹ Monte Carlo integration

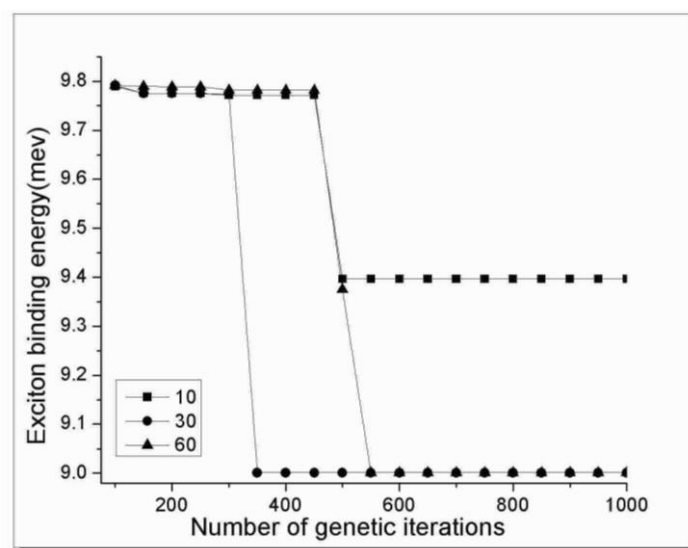


شکل ۴-۱ نمودار گردش الگوریتم ژنتیک مورد استفاده در این مطالعه

با این حال یک مطالعه جامع در مورد تاثیر مولفه های الگوریتم ژنتیک هنگامی که به یک سیستم فیزیکی اعمال شود انجام نشده است. ما این کار را در این بخش از رساله انجام داده ایم. نمودار جابجایی دیامغناطیسی بر حسب تعداد جمعیت در هر نسل در شکل (۲-۵) نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود با افزایش تعداد نسل در هر گام جابجایی دیامغناطیسی حول یک وضعیت تعادلی نوسان می کند.



شکل ۵-۱ جابجایی دیامغناطیسی برحسب تعداد جمعیت در هر نسل. خط چین مقدار میانگین را نشان می دهد. در این مطالعه تغییرات انرژی بستگی اکسیتون مقید را در یک چاه کوانتومی یگانه (با جابجایی نواری ۱۰ meV برای نوار رسانش) بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک به ازای درصد نخبگی های مختلف نیز بررسی شده است. نتایج این بررسی در شکل (۶-۲) نشان داده شده است

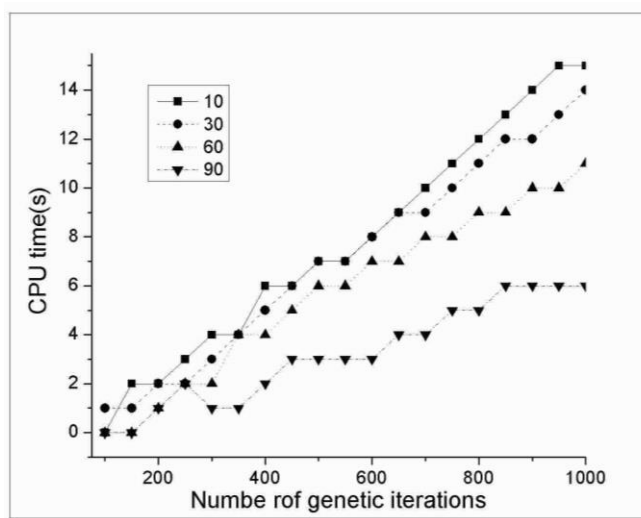


شکل ۶-۱ تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک به ازای درصد نخبگی های مختلف ذکر شده در این شکل

. همانطور که در شکل (۶-۲) مشاهده می شود افزایش درصد نخبگی از ۱۰٪ به ۶۰٪ منجر به تغییر در انرژی بستگی اکسیتون (حدود ۲meV) می شود. این مقدار تغییرات در انرژی بستگی اکسیتون که معمولاً در حدود چند میلی الکترون ولت است [۹۶] قابل توجه می باشد.

از نظر محاسباتی برای دستیابی به مقدار بهینه پارامتر مورد جستجو، مقداری قابل قبول خواهد بود که به یک انرژی بستگی کمینه منجر شود. این معیاری است که در اینجا برای پایان دادن به حلقه الگوریتم ژنتیک استفاده شده است.

برای قضاوت در مورد سرعت یک روش محاسباتی زمان اجرای آن^۱ می تواند ملاک خوبی باشد. برای بررسی این موضوع اثر درصد نخبگی روی زمان اجرای برنامه را بررسی کرده ایم. نتایج این بررسی در شکل (۷-۲) نشان داده شده است.



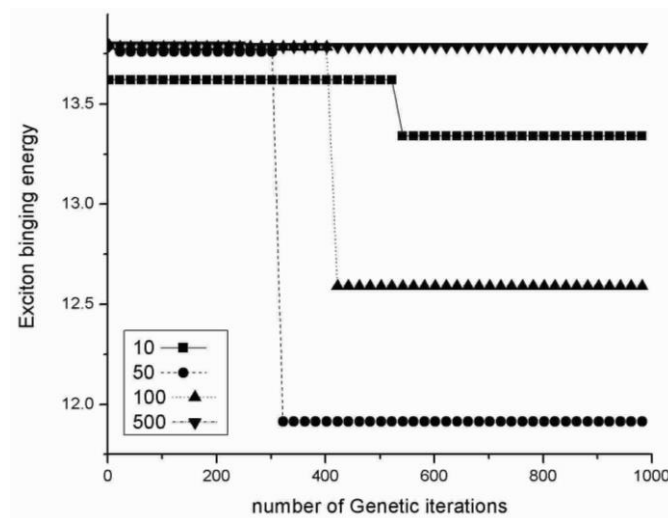
شکل ۷-۱ زمان اجرای برنامه برحسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک.

همانطور که در این شکل دیده می شود با افزایش درصد نخبگی تعداد کمتری از اعضای جمعیت وارد فرایندهای مربوط به اعمال ژنتیک نظیر گذار و جهش شده و بنابراین زمان اجرای برنامه کاهش می یابد.

شکل (۸-۲) تغییرات انرژی بستگی اکسیتون را بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک به ازای تعداد نقاط تصادفی متفاوت نشان می دهد. همانطور که در این شکل دیده می شود اگر تعداد نقاط تصادفی در فرایند انتگرال گیری مونت کارلو کم باشد (مثلاً ۵۰) در آن صورت ممکن است در انرژی بستگی اختلافی در حدود $1/5 \text{ meV}$ بوجود آید. لذا این واریسی منجر به تعیین حداقل مقدار

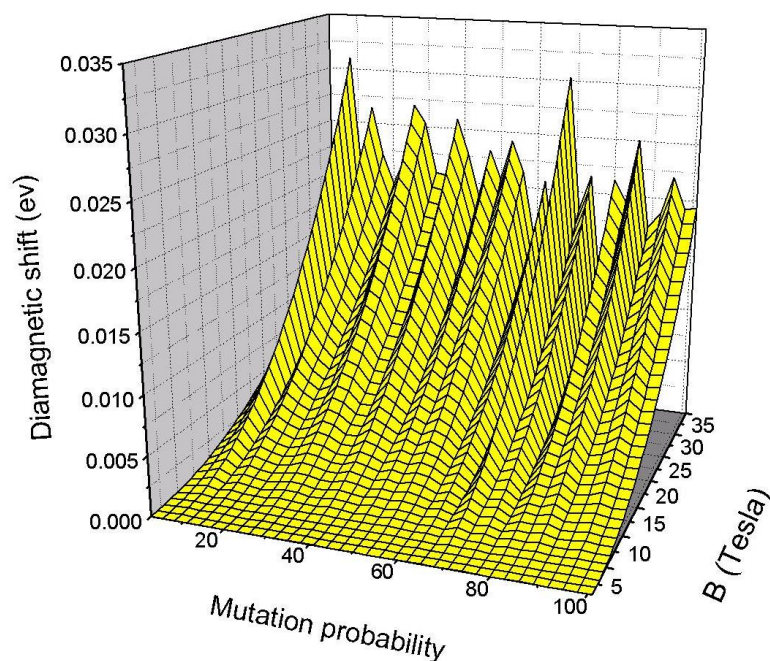
^۱ CPU time

ممکن و مورد وثوق برای انرژی بستگی می شود در عین حالی که زمان کمتری برای محاسبه دیگر کمیات فیزیکی مورد نیاز صرف می شود.

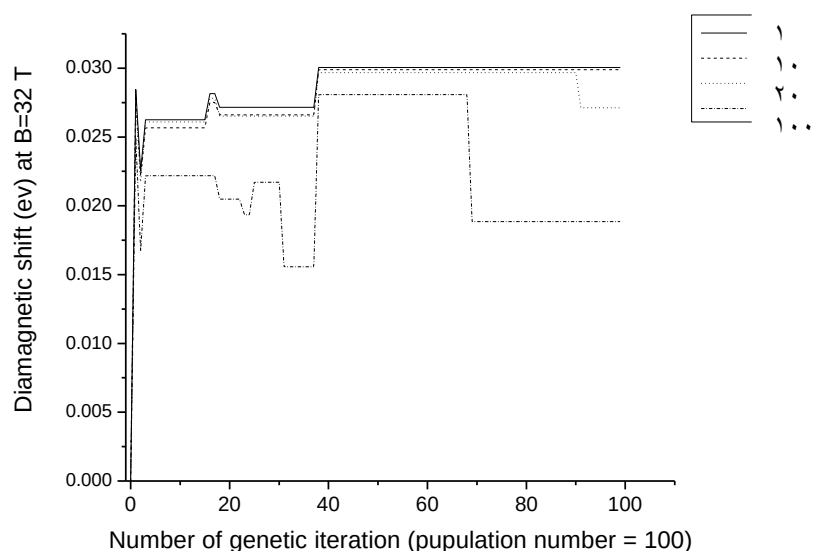


شکل ۸-۱ تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک.

بنابراین صرف اشباع یک کمیت نسبت به یک پارامتر نظیر تعداد تکرار حلقه ژنتیک، تعداد جمعیت هر نسل که گاه به عنوان معیار اتمام شبیه سازی استفاده می شود را نمی توان معیار اتمام برنامه قرار داد زیرا به ازای مقادیر مختلف درصد نخبگی این نمودار در سطوح مختلفی به اشباع می رسد. در این مطالعه تغییرات جابجایی دیامغناطیسی بر حسب احتمال جهش و میدان مغناطیسی اعمال شده نیز بررسی و نتایج آن بطور سه بعدی در شکل (۲-۹) نشان داده شده است. همانطور که این شکل نشان می دهد جابجایی دیامغناطیسی دارای حالت نوسانی بر حسب احتمال گذار است. نتایج این بررسی نشان می دهد که استفاده از یک احتمال گذار ثابت و از پیش تعیین شده در محاسبات بر پایه الگوریتم ژنتیک برای تعیین یک کمیت فیزیکی نظیر جابجایی دیامغناطیسی صحیح نمی باشد. در اصل باید احتمال گذاری را یافت که منجر به حداقل مقدار انرژی شود یعنی معیار بهتر بودن احتمال گذار کمینه بودن انرژی است. یعنی اشباع شدن یک کمیت با افزایش تعداد تکرار در حلقه ژنتیک نمی تواند معیاری برای خاتمه برنامه باشد.

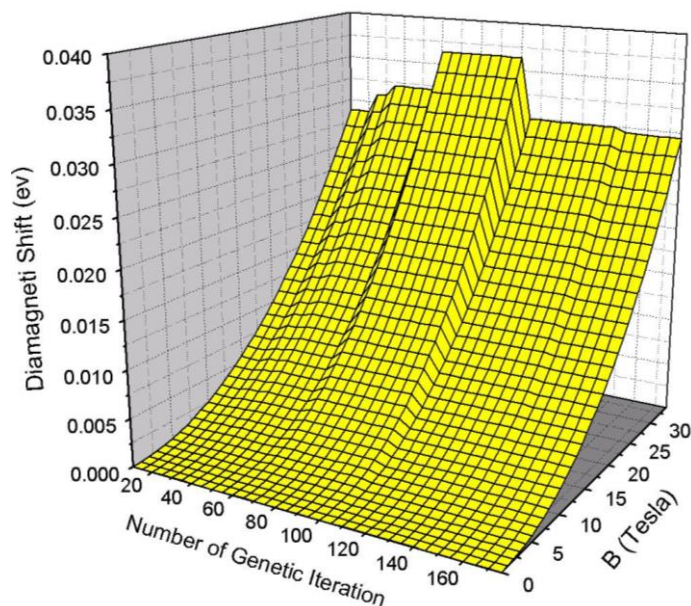


شکل ۹-۱ تغییرات جابجایی دیا مغناطیسی بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک و میدان مغناطیسی اعمال شده. برای اثبات این موضوع، نمودار جابجایی دیامغناطیسی بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک در میدان مغناطیسی $B=12T$ و تعداد جمعیت ۱۰۰ به ازای حد بالای انتگرال گیری برای پارامترهای آزاد در انتگرال رابطه (۱-۲) در شکل ۱۰-۲ رسم شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود به ازای حد های بالای انتگرال گیری متفاوت، نمودار در سطوح مختلفی به اشباع می رسد. یک حد بالای انتگرال گیری که منجر به حداقل مقدار انرژی شود درست تر به نظر می رسد.



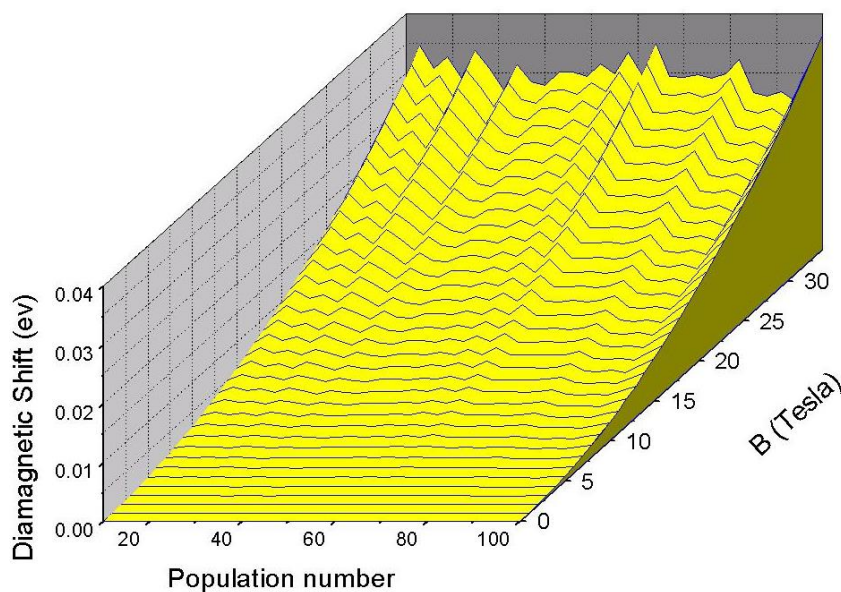
شکل ۱۰-۱ جابجایی دیامغناطیسی بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک در میدان $B=12T$ ، تعداد جمعیت ۱۰۰.

شکل (۱۱-۲) نمودار تغییرات جابجایی دیا مغناطیسی بر حسب تعداد جمعیت و میدان مغناطیسی را نشان می دهد.



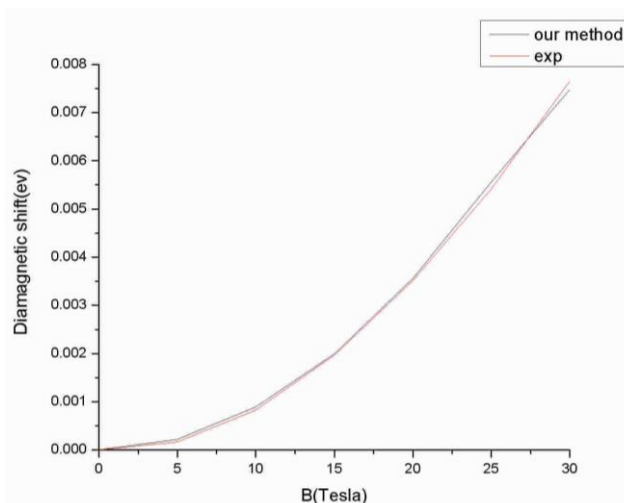
شکل ۱۱-۱ تغییرات جابجایی دیا مغناطیسی بر حسب تعداد تکرار حلقه ژنتیک.

همانطور که از شکل های ۱۱-۲ و ۱۲-۲ دیده می شود اثر مولفه های الگوریتم ژنتیک در میدان های ضعیف کم است اما با افزایش میدان مغناطیسی این اثرات (یعنی نوسان نمودار بر حسب تعداد جمعیت) نیز افزایش می یابند.



شکل ۱۲-۱ تغییرات جابجایی دیا مغناطیسی بر حسب جمعیت و میدان مغناطیسی.

اکنون به منظور مقایسه نمودار تغییرات جابجایی دیامغناطیسی بر حسب میدان مغناطیسی برای ساختار چاه کوانتومی $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$ بررسی شده است. نتیجه در شکل ۲-۱۳ نشان داده شده است. نمودار تجربی مربوط به گروه مرجع [۶۲] می باشد. توافق بسیار خوب نتیجه بدست آمده در این کار با نتایج تجربی نشانگر دقت بالای الگوریتم به کار برده شده در این محاسبه می باشد.



شکل ۱-۱۳ تغییرات جابجایی دیامغناطیسی بر حسب میدان مغناطیسی بدست آمده توسط روش ما و روش تجربی مرجع [۶۲].

برای بهبود سرعت و کارایی الگوریتم (GMV)، آن را با یک روش تعینی^۱ برای تولید اعضای نسل جدید ترکیب کرده ایم. بدین ترتیب که اعضای نسل قدیم را با جمع و یا تفریق یک عدد کوچک 'epsilon_percent' به اعضای قدیم تولید کرده ایم (برونیایی). الگوریتم این کار در شکل ۲-۱۴ آمده است.

¹ Deterministic

Computational algorithm of the *Biased Genetic Monte Carlo Variational method (BGMV)* has been implemented in this work.

- 1- Use Vegard law to estimate the parameters like effective mass of the well with the doping fraction x .

$$\left[\frac{E_e}{V_e} \right]^{1/2} = \cos \left[\left\{ \frac{m_e E_e}{2\hbar^2} \right\} L \right]$$

- 2- Find the roots of the equations: to find E_h and E_e .

$$\left[\frac{E_h}{V_h} \right]^{1/2} = \cos \left[\left\{ \frac{m_h E_h}{2\hbar^2} \right\} L \right]$$

- 3- Find the wave vectors K_e , k_e , K_h and k_h by continuity of f_e and f_h and first derivatives at interface where, $f_e(z_e) = \begin{cases} \cos(K_e z_e), & |z_e| < L/2 \\ A_e e^{-k_e |z_e|}, & |z_e| > L/2 \end{cases}$ and we have similar function for hole.

- 4- Create an $N \times 3$ matrix for the initial population using a uniform random number generator between 0 and 1 for a , b and Λ in the trial wave function which N is the number of members in the population.

- 5- Find the $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$ for each member of the population using Monte Carlo integration scheme because it is enough flexible to be generalized to more dimensions and more number of degrees of freedom. Then store these values in a one dimensional array.

- 6- Sort the energies obtained from previous step.

- 7- Retain 'elitist' percent of lowest energies for the next generation.

- 8- Generate 'epsilon_percent' of the next generation by the following method: define an infinitesimal value 'epsilon' and generate 'epsilon_percent' of the next population by adding and subtracting of the 'epsilon' to the 'elitists'.

- 9- Generate 'mutprob' percent of the population by the mutation.

- 10- Generate the remaining number of the population by the crossover.

- 11- Find the $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$ for new members of the population.

- 12- Merge new members and old ones to have a population with relative energies in an increasing order.

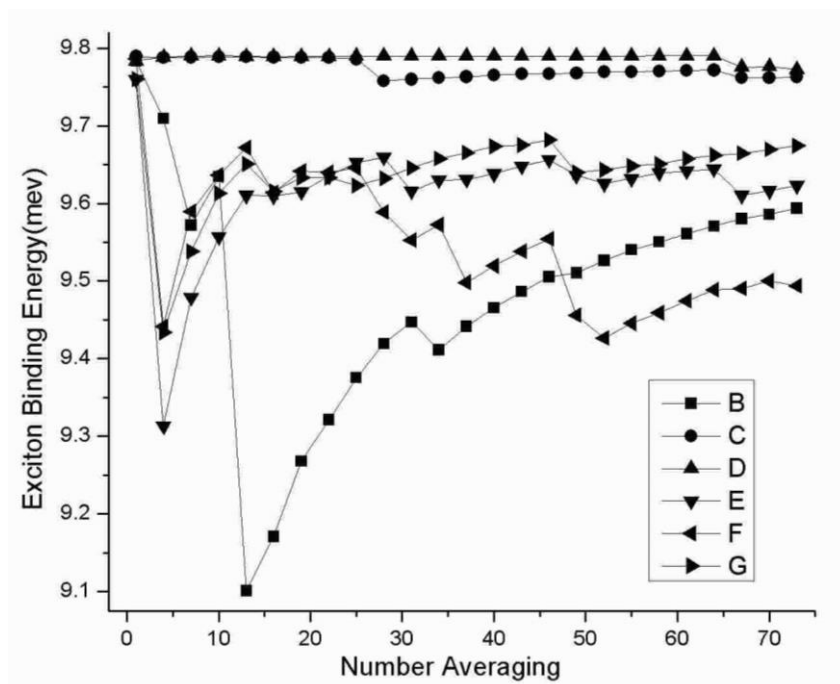
- 13- Go to step 7 until the termination criteria satisfy.

- 14- You may reset the seed of the random generator for reproductively or you may use averaging over some repetitions of the GA procedure in a new loop

- 15- Print the results

شکل ۱-۱۴ نمودار گردشی روش ژنتیک-مونت کارلو-وردشی متمایل (BGMV)

با استفاده از الگوریتم جدید تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تعداد میانگین گیری روی این کمیت فیزیکی (به ازای پارامترهای محاسباتی متفاوت الگوریتم ژنتیک) بررسی شده است. نتایج در شکل ۲-۱۵ آمده است. این کار را برای کاهش میزان افت و خیز و افزایش دقت کمیات محاسبه شده انجام داده ایم.



شکل ۱-۱۵ نمودار تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تعداد میانگین گیری در حالات مختلف با ورودی های جدول (۲-۲)

کمیات ورودی در جدول (۲-۲) آمده است.

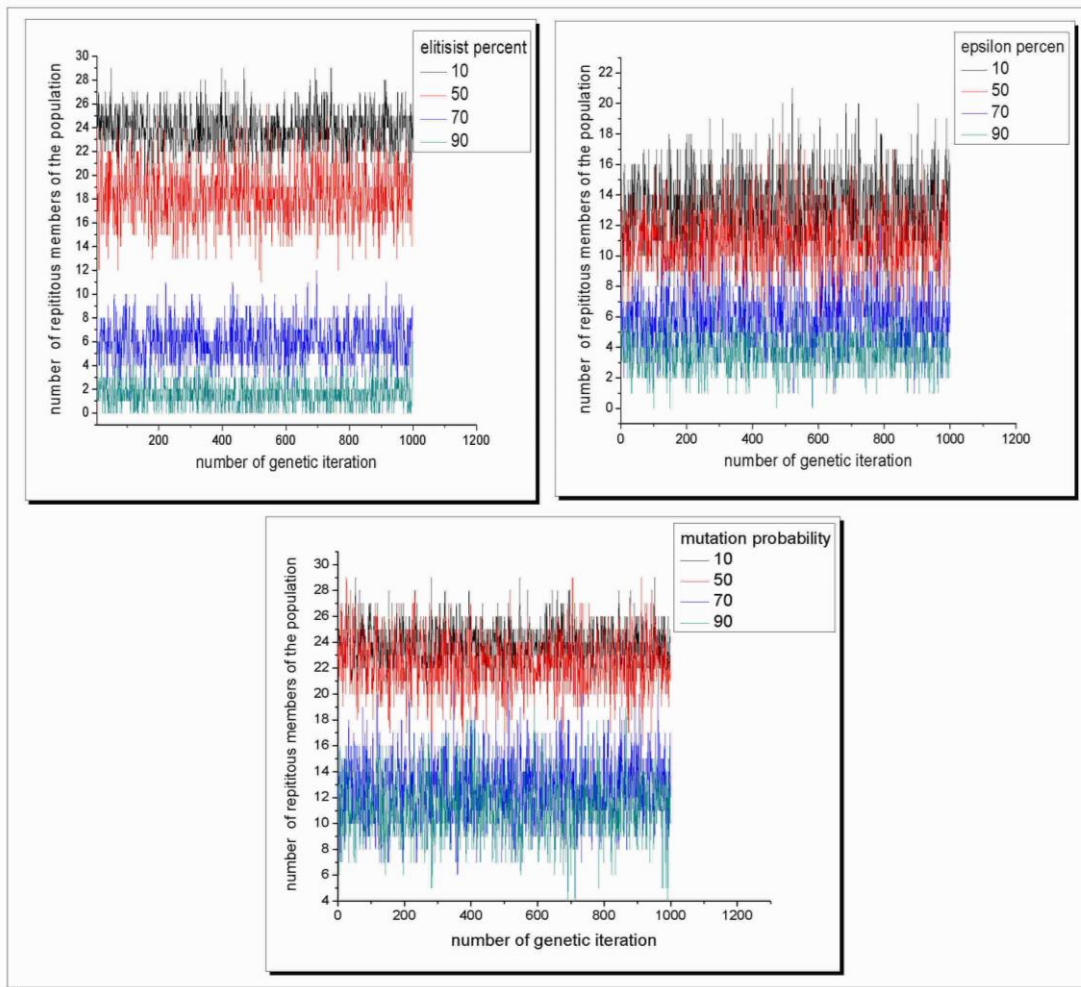
جدول ۲-۲: پارامترهای ورودی استفاده شده برای تولید شکل (۶)

	تعداد نسلها	تعداد نقاط نمونه برداری مونت کارلو	جمعیت	احتمال جهش	درصد نخبگی	Epsolon percent
B	1000	700	1000	40	10	0
C	1000	700	500	40	10	0
D	500	700	1000	40	10	0
E	1000	450	1000	40	10	0
F	1000	700	1000	5	10	0
G	1000	700	1000	40	10	40

نتایج این بررسی نشان می دهد که وقتی ما تعداد نسل و تعداد نقاط نمونه برداری در انتگرال مونت کارلو را کاهش می دهیم اثر میانگین گیری ناچیز می شود. اثر میانگین گیری به ازای تعداد کم میانگین گیری زیاد است. وقتی تعداد میانگین گیری را افزایش می دهیم افت و خیز آنها کاهش می یابد. بیشترین افت و خیز مربوط به وضعیتهای B و F است. حداکثر میزان تاثیر میانگین گیری هم با توجه به شکل ۲-۱۵ حدود ۰,۷ میلی الکترون ولت می باشد.

در پایان، تعداد حالات تکراری در جمعیت با تغییر مقدار پارامترهایی مثل epsilon_percent, احتمال جهش و درصد نخبگی را بررسی کرده ایم. نتایج این بررسی در شکل ۲-۱۶ آمده است.

همانطور که در این شکل ها دیده می شود برای تمام حالات هنگامی که این پارامترها افزایش می یابند تعداد حالات تکراری نیز کاهش می یابد.



شکل ۱-۱۶ نمودار تعداد حالات تکراری در جمعیت بصورت تابعی از تعداد تکرار حلقه ژنتیک با تغییر مقادیر درصد نخبگی، $\epsilon_{percent}$ و احتمال جهش.

هنگامی که تعداد تکرارهای ژنتیک افزایش می یابد تعداد حالات تکراری حول یک مقدار ثابت نوسان می کند. هنگامی که تعداد نخبه ها را افزایش می دهیم تعداد اعضای جمعیت که با اعمال ژنتیک تولید می شوند کم می شود بنابراین تعداد جمعیت تکراری کاسته می شود. هنگامی که 'epsilon_percent' اضافه می شود تعداد حالات تکراری کم می شود چراکه تعداد جمعیتی که بصورت تعینی تولید می شود بیشتر می شود. سرانجام ما تعدادی از اعضا را بطور تصادفی انتخاب می کنیم و سپس مقدار آنها را از کم به زیاد و بالعکس تغییر می دهیم (جهش)، بنابراین با افزایش

احتمال جهش تعداد حالات تکراری کم می شود. در این کار تعداد حالات تکراری با شمارش مستقیم انجام شده است. حذف حالات تکراری باعث می شود تا پارامترهای بهینه سریعتر بدست آیند. حقیقت دیگر آنکه، چون در این کار تعداد پارامتر آزاد کم بوده است تعداد حالات تکراری احتمال زیادی برای رخداد داشته اند. برای شرایط دیگر این نتایج ممکن است کاملاً متفاوت باشند و برای هر مساله باید بطور مجزا این کار تکرار شود.

نکته بسیار مهمی که در انجام محاسبات با روشهای اشاره شده در اینجا بایستی مد نظر قرار گیرد این است که علیرغم کارآمدی نسبتاً خوب روش های ابداع شده و قابلیت بالای آنها برای توسعه به مسائلی با تعداد بسیار بیشتر درجات آزادی و ذرات، ممکن است مشکلاتی نظیر تونل زنی به منطقه ممنوعه کلاسیکی رخ بدهد که روشهای خاصی برای برطرف کردن آن وجود دارد. یک راه تشخیص این مشکل آن است که انتگرال گیری به داخل منطقه ممنوعه کلاسیکی برای یافتن ویژه مقادیر و ویژه توابع یک معادله شرودینگر ممکن است به جوابهای نمایی افزایشی در این مناطق بیانجامد [۳۰] که به وضوح اشتباه می باشد.

۳-۲ نکات مهم در اعمال کامپیوتری روش ژنتیک-مونت کارلو-وردشی (GMV) و مواردی که ممکن است به نتایج اشتباه بیانجامد:
در هنگام استفاده از روشهای اشاره شده در این بخش، باید به نکات زیر حتما توجه شود. عدم رعایت هر کدام از این نکات ممکن است به نتایج اشتباه منجر گردد.

- ا- بهنجار نکردن تابع موج
- ب- خطاهای ناشی از گرد کردن اعداد کامپیوتر
- ت- مدیریت نادرست تکینگی ρ در نقطه صفر.
- ث- اعمال نکردن تفاوت جرم موثر در چاه و سد
- ج- عدم استفاده از واحدهای کاهیده
- ح- عدم استفاده از قانون وگارد برای مواد ترکیبی.

- خ- استفاده از توابع محاسباتی با دقت کم به عنوان مثال مولدهای اعداد تصادفی
- د- استفاده نکردن از شرایط مرزی بن-دانیل-دوک بجای پیوستگی تابع موج و مشتق آن
- ذ- استفاده نابجا از عملگرهای ژنتیک. باید به ازای هر مسئله، عملگرهای مختلف ژنتیک رصد شوند تا مقادیر بهینه آنها بدست آید.
- اگر چه بکارگیری این روش ها ساده به نظر می رسد ولی تعیین کردن پارامترهای اولیه آن برای رسیدن به جوابهایی که معنی فیزیکی بدهند دشوار است. در عین حال به دلیل اینکه این روش ها قابلیت اعمال به مسائل دشوار را دارد لذا ارزش آن را خواهند داشت که با این مشکلات روبرو شده، مسیری جدید برای حل معادله شرودینگر بس ذره ای با تعداد درجات آزادی بالا و تعداد ذرات بالا باز نماییم.

نتیجه گیری

در این فصل به بررسی شیفت دیامغناطیسی وابسته به یک اکسیتون مقید در یک چاه کوانتومی یگانه در دستگاه مختصات استوانه ای و تعدادی از ویژگیهای آن پرداخته شده است. این کار با ابداع روش ترکیبی ژنتیک-مونت کارلو-وردشی و سپس تعمیم به روش ترکیبی ژنتیک-مونت کارلو-وردشی بایاس شده (ترکیب با روش برون یابی) انجام شد. مشخص شد که منطقی نیست که از پارامترهای اولیه ژنتیک ثابت مانند یک احتمال گذار ثابت و از پیش تعیین شده در محاسبات بر پایه ژنتیک استفاده کنیم تا یک کمیت فیزیکی نظیر جابجایی دیامغناطیسی را بیابیم بلکه به معیار دیگری هم نیاز است. بطور عددی اثبات شده است که برای دستیابی به مقدار بهینه باید گفت مقداری قابل قبول است که به مقدار کمینه انرژی منجر شود و این معیاری است که در این رساله برای پایان دادن به حلقه الگوریتم ژنتیک استفاده شده است. برای کاهش زمان اجرا و افزایش دقت، تعداد حالات تکراری در جمعیت با تغییر مقدار پارامترهایی مثل `epsilon_percent`، `Mutation_probability` و `elitist_percent` مورد بررسی قرار گرفت. برای اثبات نتایج

الگوریتم ژنتیک استفاده شده در این کار، نتایج این بررسی برای تغییرات جابجایی دیامغناطیسی بر حسب شدت میدان مغناطیسی با نتایج مقالات دیگر مقایسه شد و نتیجه حاکی از دقت بالای برنامه بود. در این بخش ۵۶۰ خط برنامه C++ روی الگوریتم ژنتیک دودویی و ۹۸۰ خط برنامه C++ روی الگوریتم ژنتیک کد حقیقی نوشته شد.

فصل ۳: الگوریتم های تفاضل محدود و

مونت کارلو برای بررسی رفتار اکسیتون

های مقید در چاههای کوانتومی یگانه

$\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$ و

$\text{GaAs}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}/\text{GaAs}$

'As far as the laws of mathematics refer to reality, they are not certain; and as far as they are certain, they do not refer to reality.'

- Albert Einstein, "Geometry and Experience", January 27, 1921

۳-۱ روش تفاضل محدود برای حل معادله شرودینگر وابسته به یک اکسیتون

مقید در چاه کوانتومی یگانه $\text{GaAs}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}/\text{GaAs}$

۳-۱-۱ مقدمه

از بین روشهای محاسباتی موجود، روش تفاضل محدود که برپایه برش زنی فضا بنا می شود دارای اعمال کامپیوتری خیلی پیچیده ای نبوده و برای استفاده در چند بعد و با تعداد درجات آزادی زیادتر به استفاده از خطی سازی، تخصیص حافظه پویا و قطری سازی ماتریسهای بسیار بزرگ^۱ نیاز است. به همین دلیل برنامه نویسی آن دشوار خواهد بود. به عنوان مثال برای حل یک معادله شرودینگر تک ذره ای در سه بعد، که برای حل آن فضا در هر جهت به N قسمت مساوی بریده شده باشد یک ماتریس با ابعاد N^3 باید قطری شود. نرم افزار MATLAB با صرف زمان بسیار زیاد تنها قادر است ماتریسی متقارن از مرتبه هشت تا ده هزار را با کمک یک کامپیوتر خانگی بدون استفاده از ترفند موازی سازی روی پردازنده های مختلف قطری کند (یعنی حدوداً ۲۲ برش در هر جهت!). با این توصیفات لزوم ایجاد و توسعه روشهایی برای بهبود و یا تسریع این گونه مسایل ضروری به نظر می رسد.

در این بخش از رساله ما با استفاده از روش تفاضل محدود با گامهای مساوی و متغیر سعی کرده ایم یک روش بهبود یافته برای بررسی یک اکسیتون مقید در یک چاه کوانتومی یگانه ابداع نماییم. نوع ایجاد گامهای متغیر با تغییر مسئله عوض می شود. بنابراین درک نحوه استفاده از روش تفاضل محدود با گام متغیر راه را برای حل مسائلی با تعداد بیشتر ذرات و ابعاد فضا هموار خواهد نمود.

^۱ این ماتریس ها در بسیاری از مواقع اسپارس (sparse) هستند.

۳-۱-۲ رهیافت:

برای یافتن انرژی بستگی اکسیتون در یک چاه کوانتومی GaAs_{0.7}Sb_{0.3}/GaAs (مقدار جابجایی نواری برابر 10 meV فرض شده است [۸۱]) از هامیلتونی مورد استفاده توسط سنگر و همکارانش [۸۱] در مختصات استوانه ای و در غیاب میدان میدان مغناطیسی استفاده می کنیم:

$$H = \sum_{i=e,h} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} + V_i^{conf}(z_i) \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad (۱-۳)$$

پارامترهای موجود در این رابطه قبلا در بخش ۲-۵-۲ معرفی شده اند. حل تحلیلی معادله (۱-۳) به دلیل جفت شدگی بین درجه آزادی الکترون و حفره در راستای محور Z ها دشوار است، به همین دلیل در بیشتر موارد برای حل این معادله از روش قدرتمند حساب وردشی استفاده می شود [۹۷-۱۰۰].

اگرچه استفاده از روش وردشی، حتی با کمک یک تابع آزمون ساده، به یافتن انرژی حالت پایه با دقت بسیار خوبی منجر می شود ولی دارای این ایراد است که تنها انرژی حالت پایه را بدست می دهد و برای یافتن بقیه ویژه حالات به ایجاد توابع آزمون دیگری نیاز است که بر تابع آزمون اولیه عمود باشند. البته انجام این کار برای یافتن حالات برانگیخته زمان زیادی را صرف محاسبه پارامترهای آزاد توابع آزمون جدید خواهد کرد. بنابراین تلاش برای یافتن روشهای جایگزین بسیار مفید خواهد بود.

در اینجا برای حل این معادله بروش تفاضل محدود از تعریف دیفرانسیلی مشتق کمک گرفته ایم:

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle = & \\ -A \frac{\psi(z_e + \Delta z_e, z_h, \rho) - 2\psi(z_e, z_h, \rho) + \psi(z_e - \Delta z_e, z_h, \rho)}{\Delta z_e} & \\ -B \frac{\psi(z_e, z_h + \Delta z_h, \rho) - 2\psi(z_e, z_h, \rho) + \psi(z_e, z_h - \Delta z_h, \rho)}{\Delta z_h} & \quad (۲-۳) \\ -C \frac{\psi(z_e, z_h, \rho + \Delta \rho) - 2\psi(z_e, z_h, \rho) + \psi(z_e, z_h, \rho - \Delta \rho)}{\Delta \rho} & \\ -\frac{C}{\rho} \frac{\psi(z_e, z_h, \rho + \Delta \rho) - \psi(z_e, z_h, \rho)}{\Delta \rho} + V^{eff}(z_e, z_h, \rho) \psi(z_e, z_h, \rho) & \end{aligned}$$

که در این رابطه A و B و C و پتانسیل موثر با روابط زیر داده می شوند:

$$A = \frac{\hbar^2}{2\mu}, \quad B = \frac{\hbar^2}{2m_e}, \quad C = \frac{\hbar^2}{2m_h} \quad \text{و} \quad V^{eff}(z_e, z_h, \rho) = -\frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad (3-3)$$

رابطه ۲-۳ یک ماتریس ویژه مقداری است. ابعاد این ماتریس تنها با ده برش در جهات z_e و z_h و ρ برابر است با 1000×1000 !. توجه شود که ده برش در هر جهت مقدار ناچیزی است. این ماتریس اسپارس است و ماتریسهای با ابعاد بسیار بزرگ با کمک روش لانشوز^۱ قابل قطری سازی می باشد [۱۰۱]. نکته دیگری که باید به آن توجه کرد این است که برای انجام هر محاسبه ابتدا باید محدوده کلاسیکی یا کوانتومی را کنترل کنیم. به عنوان مثال در هنگام استفاده از روشهای عددی (مخصوصاً روشهای بر پایه گسسته سازی فضا نظیر روش تفاضل محدود یا روش تیر اندازی^۲) انتگرال گیری به داخل منطقه ممنوعه کلاسیکی برای یافتن ویژه مقادیر و ویژه توابع یک معادله شرودینگر ممکن است به جوابهای نمایی افزایشی اشتباه در این مناطق منجر شود. برای جلوگیری از این اتفاق می توان از روشهای برپایه اتصال^۳ استفاده کرد [۳۰]. اکنون انرژی بستگی اکسیتون E_b را می توان با کمک رابطه ۲-۵-۴ بدست آورد.

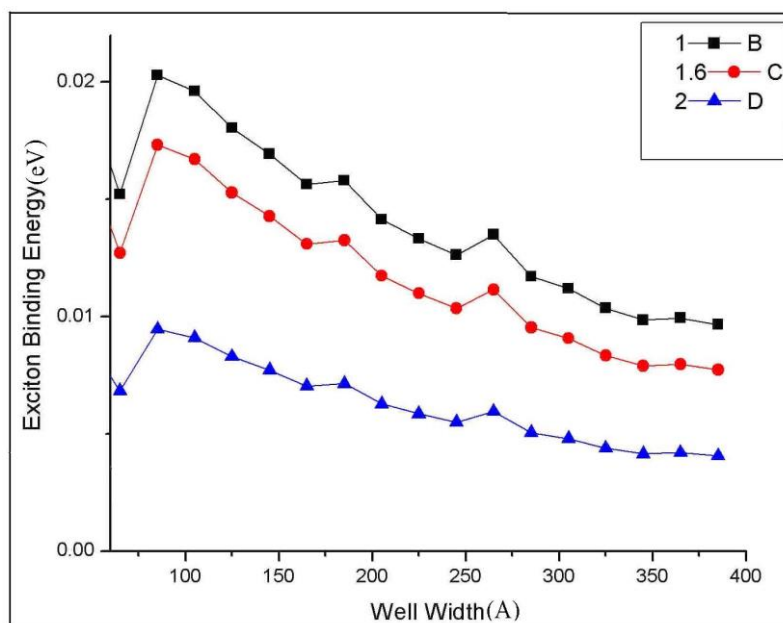
برای بررسی رفتار یک اکسیتون مقید در چاه کوانتومی یگانه GaAs_{0.7}Sb_{0.3}/GaAs فضا را در راستاهای z_e, z_h و ρ به ترتیب به N_{ze}, N_{zh} و N_{rho} قسمت تقسیم کرده ایم. بنابراین ماتریس هامیلتونی حاصله دارای ابعاد $N_{rho} \times N_{zh} \times N_{ze}$ خواهد شد. این ماتریس به کمک توابع کتابخانه ای موجود قطری سازی شده و ویژه مقادیر و ویژه بردارهای آن بدست آمده است. به دلیل اینکه مقدار تابع موج با افزایش ρ کاهشی است. یک الگوریتم تفاضل محدود با گام متغیر طراحی کرده ایم که به کمک آن تاثیر ρ های بزرگتر کمتر می شود. در این کار مقدار هر گام با شروع از مبدا ρ را N_mesh برابر کرده ایم و سپس این مقدار را تغییر داده ایم تا حد نهایی بهبود انرژی حالت پایه

¹ Lanczos method

² Shooting method

³ Matching methods

بدست آید. این حد زمانی است که کمترین مقدار انرژی با کمک قطری سازی هامیلتونی وابسته به اکسیتون بدست آید. نتایج این بررسی در شکل (۳-۱) آمده است. با افزایش بیشتر N_{mesh} از ۲ برنامه واگرا می شود. در این نمودار تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تغییرات عرض چاه دیده می شود. مقادیر N_{mesh} نیز در شکل نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود با افزایش N_{mesh} انرژی بستگی کاهش یافته و به مقادیر تجربی گزارش شده [۶۲] نزدیک می شود.



شکل ۱-۲ تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تغییرات عرض چاه.

۲-۳ روش مونت کارلو برای حل معادله حاکم بر یک اکسیتون مقید در چاه

های کوانتومی یگانه $\text{GaAs}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}/\text{GaAs}$ و $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$

۳-۲-۱ مقدمه

طبیعت پر است از فرایندهایی که اگر به طور دقیق آنها را بررسی کنیم بطور تصادفی رفتار می کنند (و یا حد اقل این طور به نظر می رسد). به عنوان مثال، نوسانهای حرارتی اتمها در یک چاه انرژی پتانسیل، به نظر می رسد که یک پدیده تصادفی باشد. بنابراین پخش اتمی لزوماً فرایندی تصادفی است. وقتی یک اتم در یک شبکه اتمی پخش می شود مسیر آن در هر پرش تصادفی است. در حالات ساده، رفتار میانگین یک پدیده تصادفی را می توان بطور تحلیلی به دست آورد. متأسفانه بسیاری از مسائل علمی مورد علاقه به ندرت ساده هستند و مشاهده مستقیم آنها نیز تنها بعضی مواقع ممکن است. گستره ای از رهیافتهای نظری و محاسباتی برای پیش بینی پدیده های جمعی به کار می روند. برای مثال دینامیک مولکولی^۱ یک روش قدرتمند است که از توابع انرژی بین اتمی استفاده می کند تا نیروی بین اتمها را محاسبه کرده و سپس از معادله حرکت نیوتن مسیر حرکت اتمها را پیش بینی نماید. در هر صورت این مسیر ها شامل ارتعاش اتمها می شود و بنابراین دینامیک مولکولی قادر نیست پدیده های در مقیاسهای بزرگتر را بررسی کند. روش المان محدود^۲ در نقطه مقابل قرار دارد و برای حل مسایل مکانیک جامدات، انتقال حرارت و دیگر زمینه ها ارزشمند است. وقتی جزئیات اتمی یا میکروساختارها مهم اند طبیعت پیوسته این روش آنرا بی ارزش می کند.

¹ Molecular Dynamics

² Finite element method

روش مونت کارلو یک رهیافت تقریباً کلی برای استخراج رفتار سینماتیکی یا ترمودینامیکی گذارهای پایه ای فراهم می کند. این رهیافت دارای انعطاف پذیری ذاتی زیادی در توضیح فرایند های پایه ای دارد و می تواند مقیاسهای فضایی و زمانی مختلفی را بررسی کند. این روش شامل یک دسته از الگوریتم های محاسباتی است که بر اساس تکرار تصادفی نمونه برداری برای محاسبه نتایج استوار می باشد. روشهای مونت کارلو معمولاً زمانی استفاده می شوند که امکان محاسبات دقیق با یک الگوریتم قطعی^۱ فراهم نباشد. اصطلاح مونت کارلو در سال ۱۹۴۰ هنگام فعالیت های فیزیکدانان بر روی یک پروژه بمب اتمی در آزمایشگاه بین المللی لس آلاموس مطرح شد. نام مونت کارلو برگرفته از نام یک کازینو در موناکو می باشد. تصادفی بودن و تکرار طبیعی فرایندها مشابه فعالیت ها در کازینوها است. مونت کارلو نام منطقه ای بسیار مشهور در کشور خودمختار موناکو واقع در اروپای غربی است. نام «مونت کارلو» توسط تحقیقات فیزیکدانانی چون استنلی اولام، انریکو فرمی و جان فون نیومن شهرت فراوان یافت.

روش های تصادفی برای محاسبه و آزمایش (که عموماً به عنوان شبیه سازی تصادفی شناخته می شوند) را بدون تردید می توان تا اولین پیشگامان نظریه احتمال (سوزن بافون^۲ توسط ویلیام گوست) و به طور ویژه تا دوران قبل از محاسبات الکترونیکی دنبال کرد. تفاوت اساسی که معمولاً درباره^۳ روش شبیه سازی مونت کارلو بیان می شود این است که به طور اصولی روش شبیه سازی را وارون می کند و یک مدل مشابه احتمالی برای مسایل مورد نظر مطرح می کند. روش های مرسوم برای شبیه سازی و مدل سازی آماری عموماً عکس این کار را انجام می دهند: استفاده از شبیه سازی برای بررسی مسایل مشخص قطعی. مونت کارلو یک مسئله قطعی را به یک مسئله تصادفی تبدیل و آن را حل می کند.

از زمانی که در اوایل دهه ۱۹۵۰ اولین روش مونت کارلو برای سیستم های کلاسیکی ارائه شد، چندین الگوریتم دیگر هم ارائه شده است [۱۰۲-۱۰۴]. تقسیم بندی آنها با هم متفاوت است و به

^۱ Deterministic Algorithm

^۲ Buffon

این بستگی دارد که بیشتر چه جنبه ای از مسئله مورد بررسی است. برای نمونه می توان آنها را برحسب اینکه: آیا درجات آزادی آنها پیوسته است یا نه، آیا در حالت پایه کار می کنیم یا در چارچوب دما-محدود، و یا حتی بر حسب طرز پیاده سازی تقسیم بندی کرد.

روش وردشی مونت کارلو^۱ برپایه اصل وردشی کوانتوم استوار است. در این روش ابتدا یک تابع موج آزمایشی، که معمولاً به تعدادی پارامتر بهینه سازی بستگی دارد، مطابق با شرایط فیزیکی مسئله انتخاب می شود و سپس درجات آزادی پیکر بندی های محتمل تر با استفاده از الگوریتم متروپلیس^۲ مورد قبول واقع می شوند و یا رد می گردند. البته محدودیت این روش در آن است که جواب نهایی مسئله به کیفیت تابع موج آزمایشی حدس زده شده بسیار حساس است و نیاز بهینه سازی پارامترهای وردشی زیادی می باشد [۱۰۵-۱۰۶].

۲-۲-۳ رهیافت

برای یافتن انرژی بستگی یک اکسیتون در یک چاه کوانتومی مفروض از هامیلتونی داده شده با رابطه ۱-۳ در مختصات استوانه ای استفاده می کنیم. متغیرهای مربوط به درجات آزادی مختلف در این رابطه بطور تحلیلی قابل جداسازی نیستند بنابراین حل تحلیلی این معادله ساده نخواهد بود. در بخش قبل دیدیم حل عددی این معادله برپایه روشهای برشی هم چندان ساده نیست. در طی دهه های گذشته رهیافت های مختلفی برای تصویر کردن این هامیلتونی در جهات مختلف ارائه شده اند. بسط سری فوریه یک نمونه از این روشها است [۱۰۷]. در ادامه روشهای مختلف این تصویر کردن را بررسی می کنیم. اولین روش یک پتانسیل کولنی دوبعدی بصورت زیر تعریف می کند [۱۰۸-۱۱۲]:

$$V(\rho) = -\frac{e^2}{\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dz_e dz_h \frac{f_e^2(z_e) f_h^2(z_h)}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad (4-3)$$

¹ Variational Quantum Monte Carlo

² Metropolis algorithm

در نتیجه هامیلتونی (۱-۳) را می توان بصورت زیر تجزیه کرد:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + V(\rho) - E_b \right\} \psi_{e-h}(\rho) = 0 \quad (۵-۳)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_{e,h}} \frac{\partial^2}{\partial z_{e,h}^2} + V_{e,h}(z_{e,h}) - E_{e,h} \right\} f_{e,h}(z_{e,h}) = 0 \quad (۶-۳)$$

در این روابط $f_{e,h}(z_{e,h})$ ها توابع پوش^۱، E_b انرژی بستگی اکسیتون و $E_{e,h}$ ها انرژی زیرنوارهای^۲ الکترون و حفره هستند.

معرفی یک فاکتور ساختار $F(\rho)$ بصورت زیر راه دوم برای تصویر کردن هامیلتونی چند بعدی در یک بعد است [۱۱۳-۱۱۴]:

$$F(\rho) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du K_0(u) \int dz_e e^{iuz_e/\rho} |f_e(z_e)|^2 \int dz_h e^{iuz_h/\rho} |f_h(z_h)|^2 \quad (۷-۳)$$

که در این رابطه K_0 تابع بسل بهبود یافته^۳ است. اکنون پتانسیل کولنی دوبعدی بصورت زیر داده می شود:

$$V(\rho) = -\frac{e^2}{\kappa\rho} F(\rho) \quad (۸-۳)$$

راه سوم برای جداسازی متغیر ها استفاده از پارامتر وردشی η بصورت زیر است [۱۱۵-۱۱۶]:

$$\frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} = \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{\eta}{\rho} \quad (۹-۳)$$

که پارامتر η با کمک رابطه زیر بدست می آید [۱۱۶]:

$$\eta \left\langle \frac{1}{\rho} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \right\rangle \quad (۱۰-۳)$$

راه چهارم استفاده از پارامتر γ_x بصورت زیر است [۱۱۷-۱۱۸]:

^۱ Envelop functions

^۲ Subband energies

^۳ Modified Bessel function

$$V(\rho) = \frac{e^2}{\varepsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f_e^2(z_e) f_h^2(z_h)}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} dz_e dz_h = \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1 - e^{-\gamma_x \rho}}{\rho} \quad (11-3)$$

که در این رابطه γ_x به ابعاد چاه کوانتومی وابسته است. به منظور یافتن γ_x از رابطه زیر استفاده می کنیم:

$$\langle V(\rho) \rangle_\rho = \frac{e^2}{\varepsilon_0} \int_0^\infty \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f_e^2(z_e) f_h^2(z_h)}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} dz_e dz_h d\rho = \frac{e^2}{\varepsilon_0} \left\langle \frac{1 - e^{-\gamma_x \rho}}{\rho} \right\rangle_\rho \quad (12-3)$$

استفاده از معادلات (3-8) و (3-12) بجای معادله سه بعدی برهمکنش کولنی (3-1) مزایای زیادی دارد. اولاً این کار هامیلتونی را به معادلات شرودینگر یک بعدی می شکند. ثانیاً به یک برنامه نویسی پایتر منجر می شود. زیرا در این کار از نوسانات سریع توابع پوش میانگین گیری می شود. در حقیقت با افزایش گستره انتگرال گیری لزوماً باید تعداد نقاط نمونه برداری در انتگرال مونت کارلو را اضافه کنیم تا به یک دقت مطلوب دست یابیم. اگر انتگرالده یک تابع کند تغییر باشد این کار لزومی ندارد. اگر پتانسیل کولنی به Z_e و Z_h بستگی داشته باشد بایستی از توابع پوش استفاده کنیم. اکنون در انتگرال مونت کارلو تعداد بیشتر نقاط نمونه برداری لازم است.

علت استفاده از روش انتگرال مونت کارلو در این کار این است که وقتی تعداد ذرات سیستم و یا درجات آزادی آنها زیاد می شوند بایستی از انتگرال های چندگانه استفاده نمود و انتگرال مونت کارلو در ابعاد بالا کارآمدتر است. به عنوان مثال، خطا در یک روش انتگرال گیری تعینی مثل سیمپسون¹ در فضای n بعدی متناسب با $1/N^{4/n}$ است و خطای مونت کارلو متناسب با $1/\sqrt{N}$ است [119]. در اینجا N تعداد نقاط نمونه برداری در روش مونت کارلو یا تعداد برشها در روش سیمپسون است. بنابراین روش انتگرال گیری مونت کارلو در ابعاد $6-8 \leq n$ بسیار کارآمدتر از روشهای تعینی است. در اینجا N تعداد برش در روش تعینی و تعداد نقاط نمونه برداری در روش مونت کارلو است. علیرغم اینکه روش انتگرال گیری مونت کارلو ویژگیهای چشمگیری در ابعاد بالا دارد اما باید دقت آن را کنترل نمود. در این کار ما چنین خطاهایی را محاسبه کرده ایم. انواع

¹ Simpson

مختلفی از انتگرال گیری مونت کارلو وجود دارد [۱۱۹]. در این کار ما از روش میانگین نمونه^۱ استفاده کرده ایم زیرا دقت بیشتری نسبت به دیگر روشها دارد [۱۱۹]. در این محاسبات از هیچ روش کاهش واریانسی استفاده نشده است. اگر انتگرالده با $f(x)$ داده شود آنگاه خطای انتگرال مونت کارلو بصورت زیر تعریف می شود:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{N}} \quad (۱۳-۳)$$

۳-۲-۳ حساب وردشی

انتخاب یک تابع موج آزمون با توجه به هندسه و ویژگیهای نوعی مسئله مورد بررسی گام اساسی در یک مسئله حساب وردشی به منظور استخراج انرژی حالت پایه یک هامیلتونی کوانتومی است. علیرغم اینکه برای مسئله بررسی یک اکسیتون مقید در یک چاه کوانتومی تعدادی از توابع موج مقایسه شده اند [۱۲۰-۱۲۱] لیکن یک مطالعه جامع در این زمینه برای بررسی پارامترهای موجود در این توابع موج وجود ندارد. در مقالات علمی ارائه شده انواع گوناگونی از توابع آزمون برای اکسیتون مقید در یک چاه کوانتومی مورد استفاده قرار گرفته است. یکی از آنها تابع موج گروه سنگر است که بصورت زیر تعریف می شود [۶۲]:

$$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = f_e(z_e) f_h(z_h) \exp(-\lambda \sqrt{\rho^2 + a^2} (z_e - z_h)^2) \times \exp(-b^2 \rho^2) \quad (۱۴-۳)$$

که در این رابطه λ و a و b پارامترهای آزاد این روش می باشند که ما مقدار آنها را با کمک الگوریتم مونت کارلو مشخص خواهیم کرد. توابع $f_i(z_{i=e,h})$ نیز توابع پوش هستند که بصورت زیر تعریف می شوند:

$$f_{e,h}(z_{e,h}) = \begin{cases} \cos(k_{e,h} z_{e,h}), & |z_{e,h}| < L/2 \\ A_{e,h} e^{-K_{e,h} |z_{e,h}|}, & |z_{e,h}| > L/2 \end{cases} \quad (۱۵-۳)$$

در این رابطه e و h نمایشگر الکترون و حفره و $k_{e,h}$ و $K_{e,h}$ اعداد موج وابسته به ذره واقع در درون و بیرون چاه می باشند. شکل دیگر معادله (۱۴-۳) بصورت زیر است [۱۲۲-۱۲۷]:

¹ Sample mean method

$$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = f_e(z_e) f_h(z_h) \exp(-\lambda \sqrt{\rho^2 + a(z_e - z_h)^2}) \quad (16-3)$$

و همچنین شکلی دیگر برای تابع موج آزمون بصورت زیر داده می شود [۱۳۲-۱۲۸]:

$$\psi(\rho) = \exp(-\lambda \rho) \quad (17-3)$$

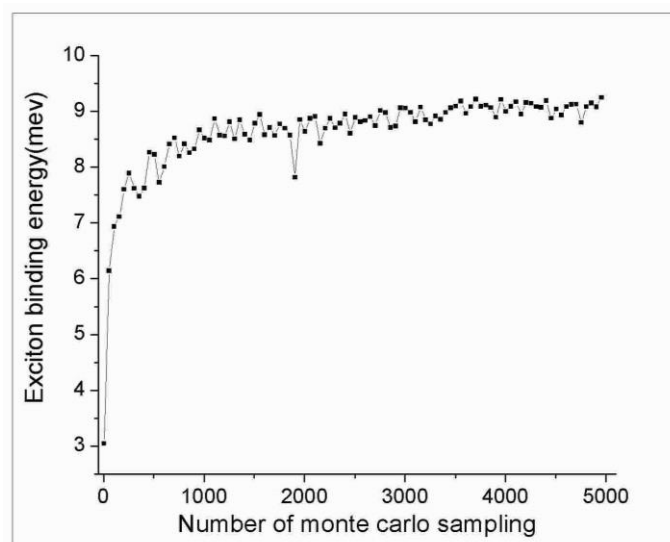
این تابع موج در این رابطه وابستگی به $|z_e - z_h|$ ندارد. پارامتر وردشی λ در این رابطه شعاع بوهر اکسیتون است هنگامی که انرژی کمینه شده باشد [۱۳۳]. انرژی حالت پایه نیز با کمینه کردن رابطه زیر (در این بخش با روش مونت کارلو) بدست می آید:

$$E_0 = \text{Min}_{a,b,\lambda} \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (18-3)$$

شکل های دیگری از توابع موج آزمون استفاده شده در مراجع دیگر داده شده اند [۱۳۴-۱۳۶].

۳-۲-۴ نتایج و بحث

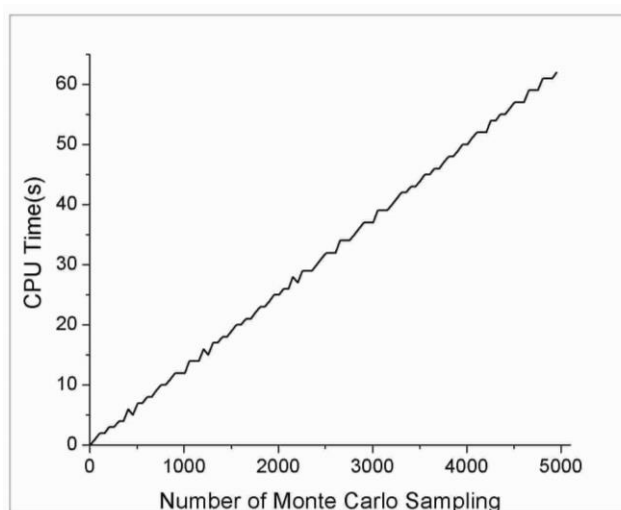
ابتدا به بررسی دقت محاسبات انجام شده می پردازیم. در ابتدا تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تعداد نقاط نمونه برداری در انتگرال مونت کارلو را بررسی می کنیم که نتایج آن در شکل ۳-۲ آمده است.



شکل ۳-۲ نمودار تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تعداد نقاط نمونه برداری در انتگرال مونت کارلو.

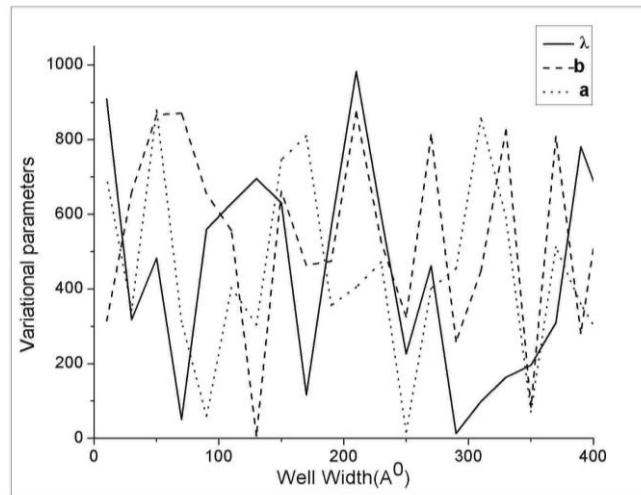
با کمک این بررسی قادر خواهیم بود که حد اقل تعداد نقاط نمونه برداری که منجر به حصول دقت کافی می شود را تعیین کنیم. همانطور که در این شکل دیده می شود با افزایش تعداد نقاط نمونه برداری نوسانات در نمودار کاهش می یابد. با کمک این نمودار مشخص می شود که حد اقل تعداد نقاط نمونه برداری برابر با ۲۰۰۰، در انتگرال مونت کارلو مقدار مناسبی است. البته این عدد تنها برای این مسئله و شرایط فیزیکی حاکم بر آن صحیح است و برای مسائل دیگر بایستی این بررسی مجدداً تکرار شود.

نمودار تغییرات زمان اجرای برنامه بر حسب تعداد نقاط نمونه برداری در انتگرال مونت کارلو برای بررسی میزان کارامدی برنامه نیز بررسی و نتایج آن در شکل ۳-۳ رسم شده است. این بررسی نشان می دهد که حد اکثر زمان اجرای برنامه از مرتبه چند ده ثانیه بوده و رفتار آن نیز خطی است.



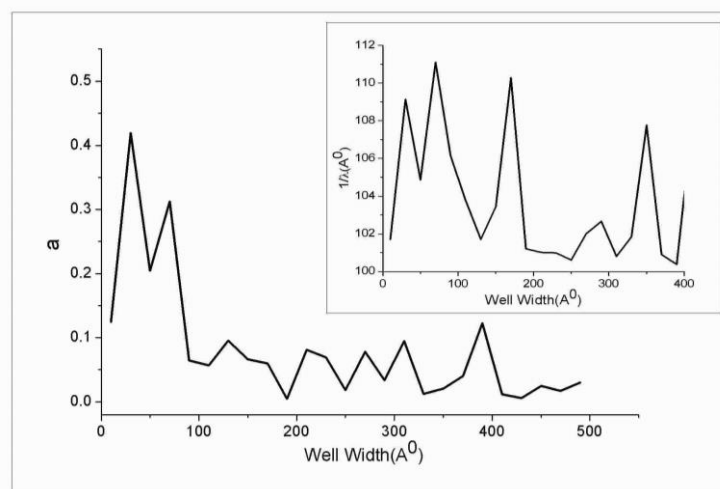
شکل ۳-۲ نمودار تغییرات زمان اجرای برنامه بر حسب تعداد نقاط نمونه برداری در انتگرال مونت کارلو.

در ادامه این مطالعه رفتار پارامترهای مختلف وردش که در معادلات ۳-۱۴ و ۳-۲-۳-۳ آمده است بررسی شده و نتایج حاصله در شکل های ۳-۴، ۳-۵ و ۳-۶ نشان داده شده است. در شکل (۳-۴) نمودار تغییرات پارامترهای آزاد $a, b, \lambda \in [0, 10^3]$ برای تابع موج معادله ۳-۱۴ رسم شده است.



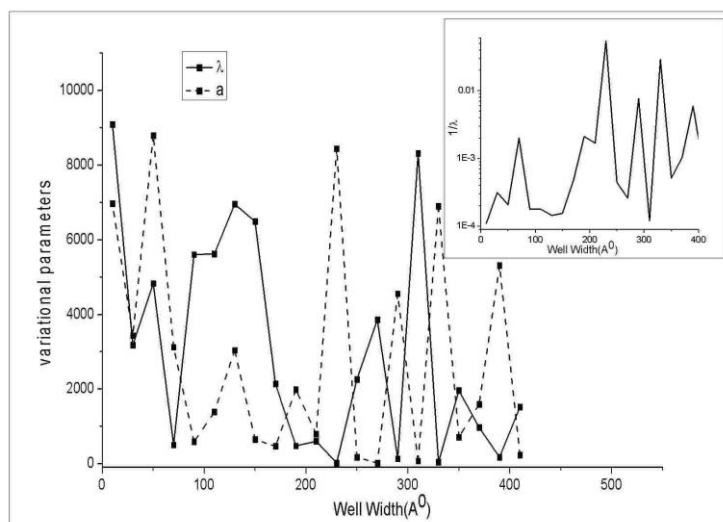
شکل ۲-۴ نمودار تغییرات پارامترهای آزاد توابع موج آزمون بر حسب عرض چاه. تغییرات پارامترهای در معادله ۳-۱۴ در گستره $[0, 1000]$.

این پارامترها هیچ رفتار مشخصی و منظمی از خود نشان نمی‌دهند. گفته می‌شود که تغییرات پارامتر a و λ شکل منظم دارد [۲۷]. هنگامی که ما اجازه دادیم a و λ به ترتیب در گستره‌های $[0, 1]$ و $[0, 10^8]$ تغییر کنند (شکل ۳-۵) تغییرات منظمی شبیه به آنها مشاهده نگردید [۲۷].



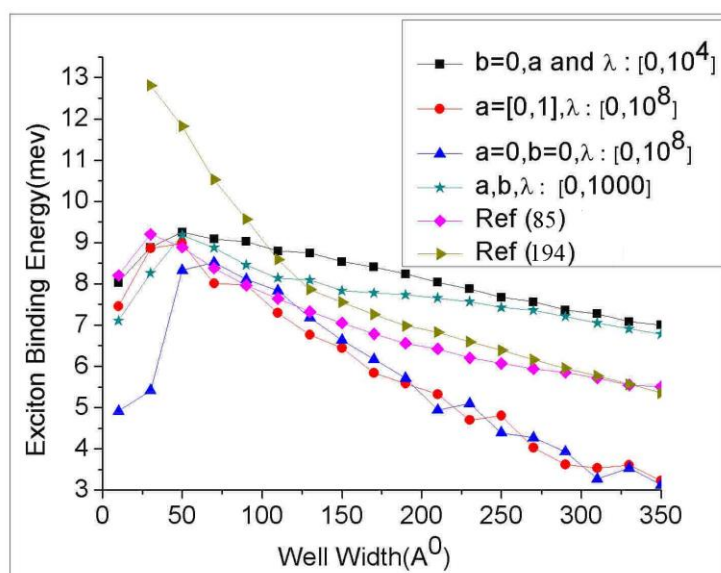
شکل ۲-۵ نمودار تغییرات پارامترهای آزاد توابع موج آزمون بر حسب عرض چاه. تغییرات پارامتر a و λ در معادله ۳-۱۶ به ترتیب در گستره‌های $[0, 1]$ و $[0, 10^8]$.

بنابراین گستره‌ها را برای هر دو پارامتر بصورت $[0, 10^4]$ در نظر گرفتیم که نتیجه در شکل (۳-۶) آمده است.



شکل ۶-۲ نمودار تغییرات پارامترهای آزاد توابع موج آزمون بر حسب عرض چاه. تغییرات پارامتر a و λ در معادله ۳-۱۶ هر دو درگستره $[0, 10^4]$.

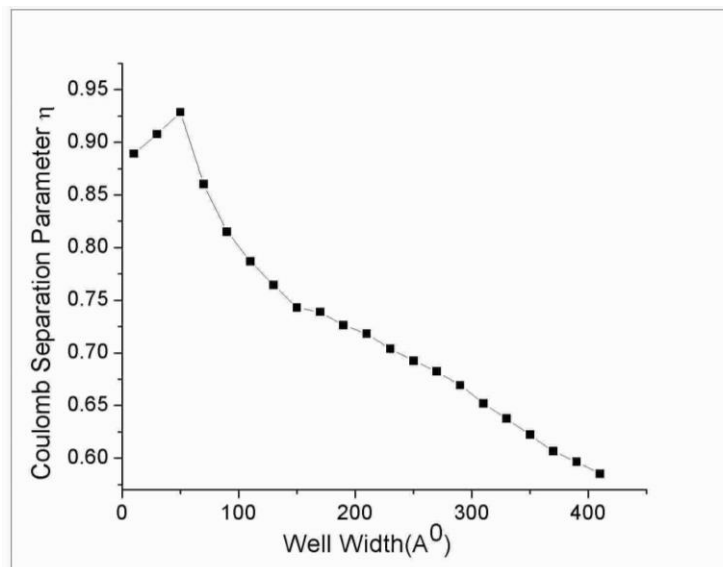
علیرغم اینکه با این انتخابها تغییرات پارامترهای آزاد دارای رفتار منظم نبودند ولی انرژی بستگی اکسیتون با دقت خوبی بدست آمد که نتایج در شکل ۳-۷ گزارش شده است. نتایج محاسبات نشان می دهد که این پارامترها، پارامترهای آزادی هستند که می توانند به گونه های مختلف بدست آیند، مقادیر مختلفی داشته باشند و در عین حال به نتایج فیزیکی قابل قبولی منجر شوند.



شکل ۷-۲ نمودار تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب عرض چاه برای توابع موج آزمون مختلف و گستره های مختلف برای پارامترهای آزاد. برای مقایسه نتایج مراجع ۸۵ و ۱۹۴ هم رسم شده است.

این نمودار مربوط به انرژی بستگی یک اکسیتون مقید در چاه کوانتومی $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$ می باشد.

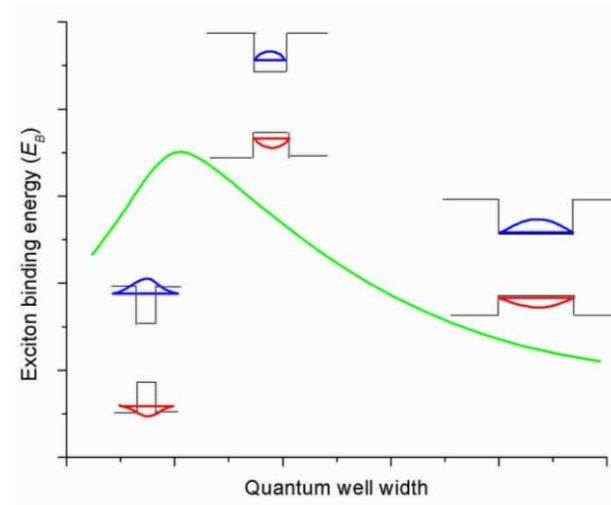
برای رسم شکل ۷-۳ ابتدا بایستی با استفاده از رابطه های (۹-۳) و (۱۰-۳) مقدار η را محاسبه کنیم و سپس با کمک معادله (۵-۳) انرژی بستگی اکسیتون را بیابیم. تغییرات η بر حسب عرض چاه در شکل (۸-۳) آمده است. همانطور که این شکل نشان می دهد این نمودار یکنوا نبوده و دلیل فیزیکی این مسئله نیز هنوز مشخص نیست.



شکل ۸-۲ نمودار تغییرات پارامتر جدایی کولنی η بر حسب عرض چاه پتانسیل.

با در دست داشتن η انرژی بستگی اکسیتون با کمک روابط (۱۴-۳) و (۱۶-۳) و (۱۷-۳) قابل محاسبه است (نتایج در شکل ۷-۳ آمده است). برای مقایسه نتایج گزارش شده در مراجع [۸۵] و [۱۹۴] نیز در این شکل رسم شده است. همانطور که در این شکل مشاهده می شود اگر معادله (۳-۳) و (۱۷) یا (۱۶-۳) را با $a \in [0,1] \ \& \ \lambda \in [0,10^8]$ به عنوان تابع آزمون استفاده کنیم سازگاری بهتری با نتایج قبلی مراجع [۸۵] و [۱۹۴] بدست نمی آید. در حالیکه اگر معادله ۱۶-۳ را با $a \in [0,10^4] \ \& \ \lambda \in [0,10^4]$ یا ۱۴-۳ را با $a, b, \lambda \in [0,10^3]$ در نظر بگیریم توافق بیشتری بدست می آید. در این محاسبات حد بالای کوچکتی برای a, b, λ استفاده شده است. اگر دو یا سه تا از این پارامترها را در گستره بزرگتر $a, b, \lambda \in [0,10^8]$ استفاده کنیم تابع موج آزمون همیشه صفر

می شود. در این حالت احتمال یافتن الکترون وحفره در همه جا صفر می شود که به وضوح اشتباه است.

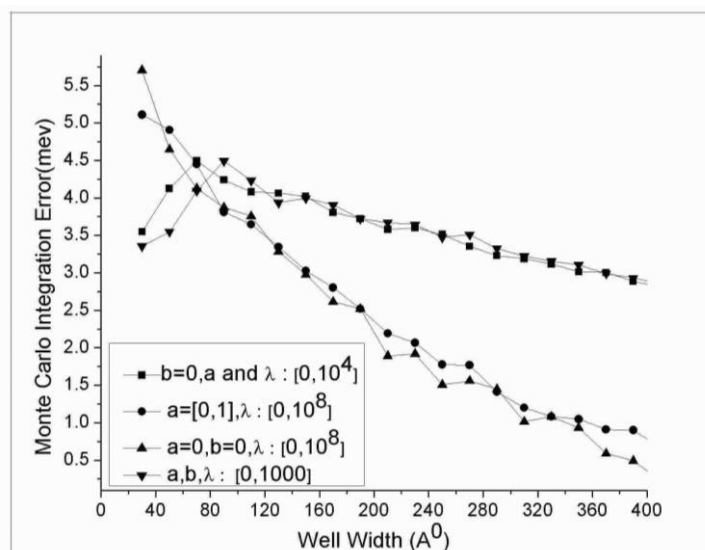


شکل ۲-۹ نمودار شماتیک تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب عرض چاه.

با توجه به شکل (۳-۹) دلیل رفتار غیر یکنوای انرژی بستگی اکسیتون بر حسب عرض چاه مشخص می شود. با کاهش عرض چاه پتانسیل محصور سازی بیشتر شده و انرژی بستگی بیشتر می شود. با کاهش بیشتر عرض چاه تونل زنی به درون سد پتانسیل نیز افزایش می یابد. بنابراین دوباره انرژی بستگی کاهش می یابد.

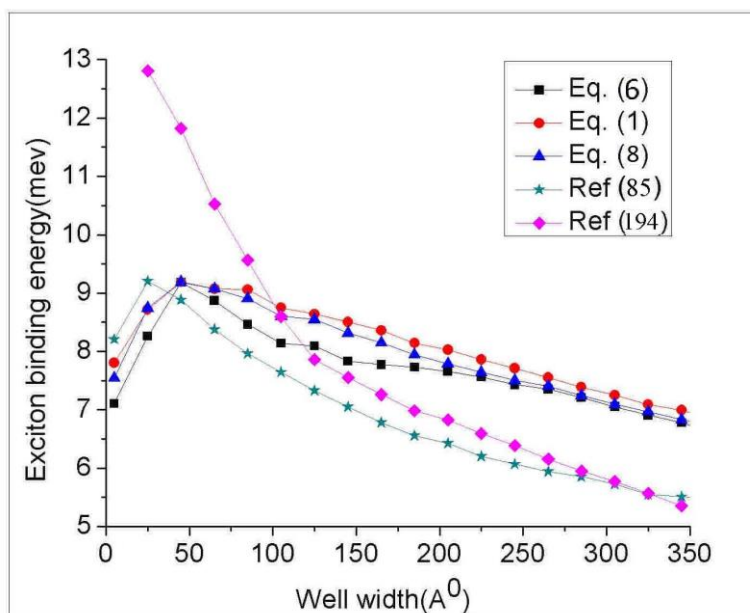
خطای وابسته به محاسبه انرژی بستگی اکسیتون مقید در چاه کوانتومی در انتگرال مونت کارلو به ازای حالات مختلف موجود در شکل (۳-۷) نیز محاسبه و در شکل (۳-۱۰) آمده است. همانطور که انتظار داریم هنگامی که از تابع موج معادله (۳-۱۷) استفاده می کنیم کمترین میزان خطا حاصل می شود. دلیل این مسئله این است که در این حالت تعداد پارامتر آزاد کمتری استفاده می شود. خطاها در دو مورد دیگر چندان متفاوت نیستند. رفتار نوسانی خطاها به خاطر طبیعت تصادفی روش انتگرال مونت کارلو است. به منظور کاهش میزان نوسان از روش میانگین گیری استفاده کرده ایم (۱۵ بار). همانطور که در شکل ۳-۱۰ دیده می شود خطای وابسته به محاسبه انرژی بستگی اکسیتون مقید در چاه کوانتومی در روش انتگرال مونت کارلو با افزایش عرض چاه کاهش می یابد و

دلیل آن این است که روش انتگرال مونت کارلو هنگامی که تابع موج کند تغییر باشد کارآمد تر است.



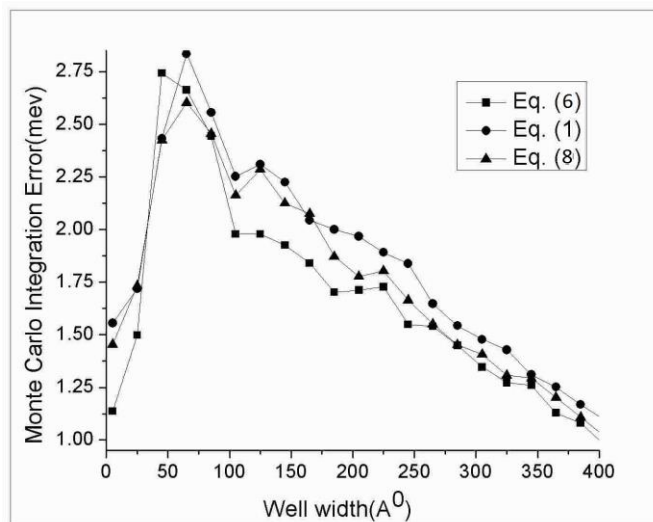
شکل ۲-۱۰ نمودار تغییرات خطای انتگرال گیری مونت کارلو بر حسب عرض چاه پتانسیل برای حالات مختلف تابع موج آزمون و گستره های مختلف به ازای پارامتر های آزاد.

با افزایش عرض چاه تابع موج پهن تر شده و کند تغییر تر می شود و بنابراین انتگرال مونت کارلو دقت بیشتری خواهد داشت. انرژی بستگی اکسیتون که با معادلات ۱ و ۶ و ۸ از بخش ۲-۲-۳ بدست آمده است در شکل ۳-۱۱ رسم شده است.



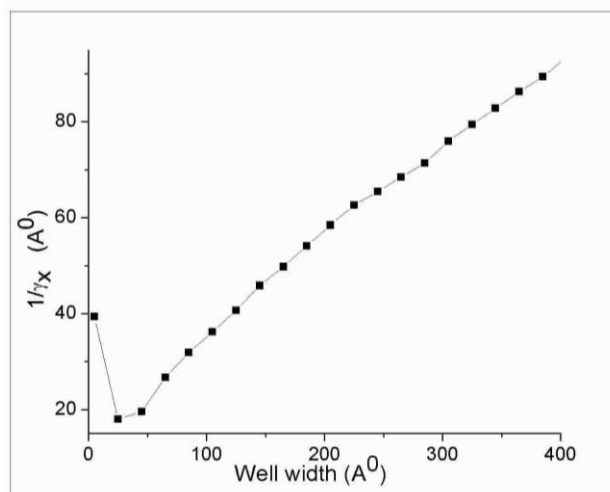
شکل ۳-۱۱ نمودار تغییرات انرژی بستگی اکسیتون در معادلات ۱ و ۶ و ۸ از بخش ۲-۲-۳ بر حسب عرض چاه. برای مقایسه نتایج حاصل از کارهای مراجع [۸۵] و [۱۹۴] نیز رسم شده اند.

برای مقایسه کارهای مراجع [۸۵] و [۱۹۴] هم رسم شده است. خطاهای موجود در استفاده از این معادلات نیز در شکل ۱۲-۳ گزارش شده است.



شکل ۱۲-۲ نمودار تغییرات خطای انتگرال گیری مونت کارلو در معادلات ۱ و ۶ و ۸ از بخش ۳-۲-۲ بر حسب عرض چاه.

نتیجه این بررسی نشان می دهد که یک شکل تابع موج آزمون بسیار ساده نظیر رابطه ۳-۱۷ می تواند به دقت کافی منجر شود و این موضوع توان روش حساب وردشی را نشان می دهد. نکته دیگر آنکه تاثیر تغییر شکل تابع موج روی خطا هم خیلی زیاد نیست. به منظور محاسبه انرژی بستگی اکسیتون با کمک معادله ۳-۱۱ ابتدا باید پارامتر γ_x را تعیین کنیم. با کمک معادله (۳-۱۲) این پارامتر محاسبه شده است. نتیجه این بررسی در شکل ۳-۱۳ داده شده است.



شکل ۱۳-۲ نمودار تغییرات پارامتر آزاد γ_x تابع موج آزمون ۳-۱۱ بر حسب عرض چاه.

رفتار مشاهده شده برای این پارامتر با گزارش مرجع ۵۵ در توافق می باشد. البته آنها در کار خود از یک هامیلتونی بی بعد استفاده کرده اند در حالیکه ما در این کار از هامیلتونی کامل استفاده نموده ایم.

نتیجه گیری

در این فصل سعی شد با کمک روش *مونت کالو* و روش *تفاضل محدود* هم به مسئله یک اکسیتون مقید در یک چاه کوانتومی یگانه نگاه شود تا بتوان نقاط ضعف و قوت این دو روش و روش ژنتیک را با هم مقایسه کرد. برای استفاده از روش تفاضل محدود در چند بعد و با تعداد درجات آزادی بیشتر به استفاده از خطی سازی، تخصیص حافظه پویا و قطری سازی ماتریسهای بسیار بزرگ نیاز است که برنامه نویسی کامپیوتری آن را با دشواری مواجه می کند که در این رساله با کمک روش قطری سازی لنشوز سعی کرده ایم از این مانع عبور کنیم. روش لنشوز نوشته شده در اینجا می تواند ماتریس ورودی را بصورت معمولی و اسپارس بگیرد و همچنین برای ماتریس های بسیار بزرگ (که حتی ارجاعات هم ممکن است زمان زیادی ببرد) می توان از تولید ماتریس اسپارس هم اجتناب کرد و درایه های ماتریس را مستقیماً به الگوریتم قطری سازی فرستاد. با استفاده از روش تفاضل محدود با گامهای مساوی و نامساوی سعی کردیم روشی بهبود یافته با مقایسه این دو طرفند ایجاد کنیم. در مرحله بعد با توجه به نقص های روش تفاضل محدود، که در متن آورده شده است، سعی کردیم از روش مونت کارلو استفاده کنیم تا یک رهیافت تقریباً کلی برای استخراج رفتار فیزیکی سیستم های تعینی و تصادفی را فراهم کند. این رهیافت، انعطاف پذیری زیادی هم در طبیعتش و هم در توضیح فرایندهای دارد و می تواند مقیاسهای فضایی و زمانی مختلفی را تحت پوشش قرار دهد. علیرغم اینکه روش انتگرال مونت کارلو ویژگیهای چشمگیری در ابعاد بالا دارد اما باید دقت آن را چک کرد. در این رساله ما چنین خطاهایی را بررسی کرده ایم. از بین روشهای مختلف انتگرال گیری مونت کارلو از روش میانگین نمونه، بدلیل

دقت بیشتر آن نسبت به دیگر روشها، استفاده کرده ایم ولی از هیچ روش کاهش واریانسی استفاده نکردیم. همچنین به منظور بررسی دقت محاسبات، نمودار تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب تعداد نقاط نمونه برداری در انتگرال مونت کارلو را رسم کردیم و به منظور کاهش میزان نوسان از ۱۵ بار میانگین گیری استفاده کرده ایم. تغییرات زمان اجرای برنامه بر حسب تعداد نقاط نمونه برداری در در روش مونت کارلو رسم گردید. با بررسی تغییرات شعاع بوهلر اکسیتونی بر حسب عرض چاه مشخص شد که با رفتار موجود در دیگر مراجع موجود در تطابق است. نمودار تغییرات پارامتر جدایی کولنی η بر حسب عرض چاه و درصد آلاش X و همچنین تغییرات انرژی بستگی اکسیتون بر حسب عرض چاه برای تابع موج آزمون مختلف و گستره های مختلف برای پارامتر های آزاد مورد بررسی قرار گرفت. در این بررسی ۷۵۰ خط برنامه C++ روی روش تفاضل محدود بصورت حل دقیق، ۱۱۵۰ خط برنامه C++ روی روش تفاضل محدود بروش تصویر روی هامیلتونی یک بعدی، ۴۴۰ خط برنامه C++ روی روش لنشوز برای قطری سازی هامیلتونی های بسیار بزرگ اسپارس و ۱۲۰۰ خط برنامه C++ روی روش مونت کارلو نوشته شد.

فصل ۴: الگوریتم تفاضل محدود برای

بررسی : ویژگیهای اپتیکی چاههای

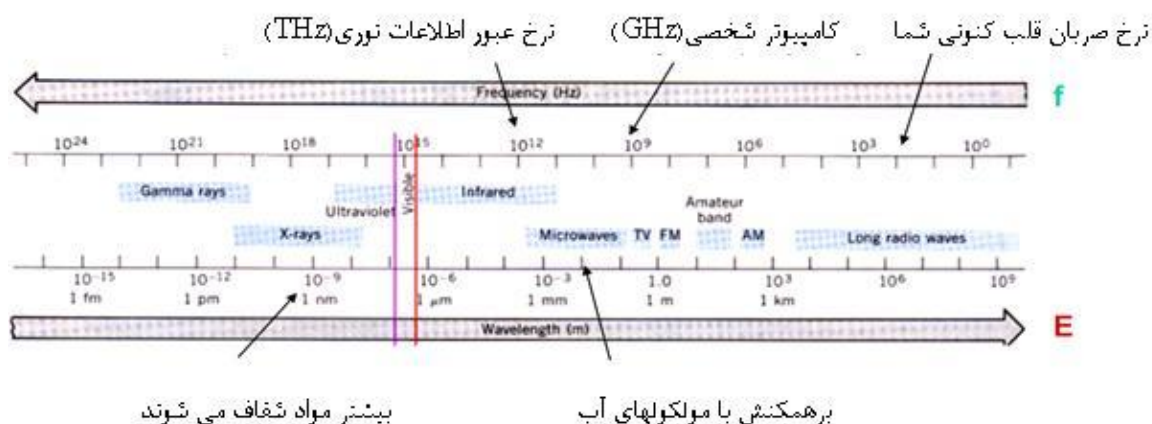
کوانتومی چند گانه GaN/AlN –

GaAl_{0.7}As_{0.3}/GaAs

اللَّهُ نُورُ السَّمَاوَاتِ وَالْأَرْضِ مِثْلُ نُورِهِ كَمِشْكَاةٍ فِيهَا
 مِصْبَاحٌ الْمِصْبَاحُ فِي زُجَاجَةٍ الزُّجَاجَةُ كَأَنَّهَا كَوْكَبٌ
 دُرِّيٌّ يُوقَدُ مِنْ شَجَرَةٍ مُبَارَكَةٍ زَيْتُونَةٍ لَا شَرْقِيَّةٍ وَلَا غَرْبِيَّةٍ
 يَكَادُ زَيْتُهَا يُضِيءُ وَلَوْ لَمْ تَمْسَسْهُ نَارٌ نُورٌ عَلَى نُورٍ
 يَهْدِي اللَّهُ لِنُورِهِ مَنْ يَشَاءُ وَيَضْرِبُ اللَّهُ الْأَمْثَالَ لِلنَّاسِ
 وَاللَّهُ بِكُلِّ شَيْءٍ عَلِيمٌ (سوره مبارکه نور، آیه ۳۵)

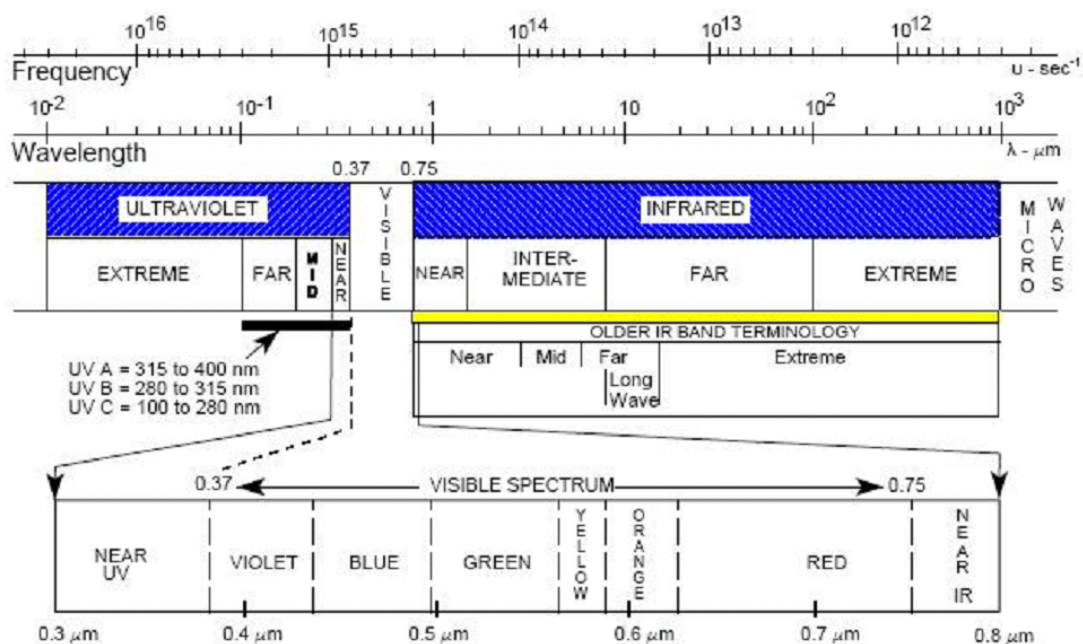
۴-۱ مقدمه

پیشرفت‌های روزافزون بشر در زمینه های مختلف علوم و فناوری باعث توجه بیش از پیش پژوهشگران به راههای تولید انرژی از منابع طبیعی موجود در جهان هستی شده است. بنابراین بشر امروزی به دنبال این است که با روشهای گوناگون انرژی مورد نیاز خود را تولید نماید. یکی از این روش‌ها، استفاده از منبع عظیم انرژی خورشیدی است. خورشید در هر ثانیه حدود ۱۰۰۰ ژول انرژی به هر متر مربع از سطح زمین منتقل می‌کند که با جمع‌آوری آن می‌توان انرژی سرشاری تولید نمود. انرژی که از طریق خورشید به زمین می‌رسد ۱۰۰۰۰ بار بیشتر از انرژی مورد نیاز انسان است [۱۳۷]. امواج نورانی خورشید که به سطح زمین می‌تابد شامل طول موجهای زیر است: ۴۷ درصد زیرقرمز، ۴۶ درصد نور مرئی، ۷ درصد فرابنفش. از این رو ابزارهای جاذب نور خورشید باید در ناحیه زیرقرمز و نور مرئی جذب بالایی داشته باشند. استفاده از ترکیبات نیمرسانا و نانوساختارهای بر پایه آن جزء ابزارهایی هستند که می‌توانند در تبدیل انرژی خورشیدی به منابع مورد نیاز بشر مورد استفاده قرار بگیرند. برای داشتن معیاری از محدوده انرژی‌های امواج الکترومغناطیسی بررسی شکل ۴-۱ مفید خواهد بود.



شکل ۱-۳ محدوده فرکانسی و انرژی امواج الکترومغناطیسی و تعدادی از مثالهای نوعی

در بررسی برهمکنش امواج نورانی و ماده محدوده فرکانسی 10^{12} تا حدود 10^{16} هرتز مورد توجه قرار می گیرد. محدوده نور مرئی در مقیاس بزرگتر در شکل ۲-۴ نشان داده شده است.



شکل ۲-۳ محدوده فرکانسی و انرژی امواج نور مرئی

نکته بسیار مهم دیگر آنکه بسیاری از رخداد های جالب فیزیکی در انرژی های چند الکترون ولتی رخ می دهد. این گستره برای چشم انسان مرئی بوده و بیشتر انرژی تابشی که به سطح زمین می رسد در این محدوده انرژی است.

الکترونهاى منفرد در اربیتالهای اتمی یک ماده مسئول واکنش در مقابل فوتون فرودى هستند. غلظت بالای الکترونها در فلزات باعث بازتاب پذیری و یا جذب بالای این مواد می شود. در عایقها ($E_g > 4\text{eV}$)، الکترونها شدیداً به هسته ها مقیدند و بنابراین پدیده جذب و شکست در این مواد ضعیف است. جذب در این مواد در منطقه ماورا بنفش^۱ رخ می دهد و منجر به تولید اکسیژن مقید (فرنکل) می گردد. در نیمرساناها ($0 < E_g < 4\text{eV}$)، الکترونها تا اندازه ای مقیدند. این مواد معمولاً در محدوده زیر قرمز شفافند و در محدوده نور مرئی و ماورا بنفش نوارهای جذبی دارند. فوتون جذب شده در این مواد می تواند اکسیژن آزاد (وانیر) تولید کند.

برای بررسی خصوصیات نوری مواد رهیافتهای مختلفی از کلاسیکی تا کوانتومی ابداع شده است. به عنوان مثال مدل‌های لورنتز و درود برای توصیف ویژگی‌های نوری به ترتیب دی‌الکتریکها و فلزات مطرح شده اند. روش ماتریس چگالی فشرده^۲ [۱۳۸]، روش فرمول الیوت [۱۳۹]، روش تابع گرین اکسیژنی [۱۴۰] سه روش ابداعی برای بررسی خواص نوری نیمرساناها می باشند. در تمام این موارد ارتباط بین ویژگیهای مختلف نوری مواد با کمک روابط کرامرز-کرونیگ برقرار می شود [۱۴۱]. شکل پتانسیل محصور سازی می تواند نقش مهمی در کیفیت ویژگیهای نوری نانو ساختارها داشته باشد. در سیستم های دوبعدی، انواع مختلف چاههای کوانتومی نظیر چاه های هذلولی^۳ [۱۴۲]، مثلثی [۱۴۳-۱۴۴]، آرایش شده بصورت دلتا [۱۴۵] و چاههای کوانتومی چندگانه [۱۴۶-۱۴۸] بررسی شده اند.

۴-۲ رهیافت

اگر یک محیط تحت تاثیر یک میدان الکترومغناطیسی خارجی قرار بگیرد از طرف میدان نیرویی بر الکترونها وارد شده و سبب قطبش القایی^۴ می شود. در صورتی که میدانها ضعیف باشند ارتباط بین

¹ Ultra violet

² Compact density-matrix approach

³ Hyperbolic

⁴ Induced polarization

قطبیدگی و میدان تابشی خطی است. اگر میدانها قوی باشند رابطه بین قطبش و میدانها الکترومغناطیسی به توانهای بالاتر این میدانها هم وابسته می شود. پدیده های نوری غیر خطی از این دسته اند.

در این مطالعه به منظور بررسی ویژگیهای نوری خطی و غیر خطی چاههای کوانتومی GaN/AlN و GaAs/GaAl_{0.7}As_{0.3} از تقریب جرم موثر با استفاده از تقریب توابع پوش استفاده شده است. بنابراین برای شروع این بررسی بایستی معادله شرودینگر موثر را حل نماییم:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{eff}(r) \right) \psi(r) = E \psi(r) \quad (۱-۴)$$

ویژه مقادیر و ویژه توابع وابسته به این هامیلتونی را می توان با کمک روش برش زنی عددی بدست آورد [۸۶]. سپس با استفاده از تقریب مرتبه اول جذب $\alpha^{(1)}(\omega)$ و تغییرات ضریب شکست

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} \quad \text{و همچنین تقریبهای مرتبه سوم آنها } \alpha^{(3)}(\omega) \quad \text{و } \frac{\Delta n^{(3)}(\omega)}{n_r} \quad \text{می توان جذب بین زیر-}$$

نوارها^۱ را به کمک روابط زیر بررسی نمود [۱۴۹]:

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \frac{\omega \mu c}{n_r} |M_{fi}|^2 \frac{m^* k_B T}{L_{eff} \pi \hbar^2} \ln \left[\frac{1 + \exp \{ (E_F - E_i) / k_B T \}}{1 + \exp \{ (E_F - E_f) / k_B T \}} \right] \times \frac{\hbar / \tau_{in}}{(E_f - E_i + \hbar \omega)^2 + (\hbar / \tau_{in})^2} \quad (۲-۴)$$

$$\alpha^{(3)}(\omega) = -\frac{\omega \mu}{n_r} \left(\frac{I}{2 \varepsilon_0 n_r} \right)^2 |m_{fi}|^2 \frac{m^* k_B T}{L_{eff} \pi \hbar^2} \ln \left[\frac{1 + \exp \{ (E_F - E_i) / k_B T \}}{1 + \exp \{ (E_F - E_f) / k_B T \}} \right] \times \frac{\hbar / \tau_{in}}{(E_f - E_i + \hbar \omega)^2 + (\hbar / \tau_{in})^2} \times \left\{ 4 |M_{fi}|^2 - \frac{|m_{ff} m_{ii}|^2 [(E_f - E_i - \hbar \omega)^2 - (\hbar / \tau_{in})^2 + 2(E_f - E_i)(E_f - E_i - \hbar \omega)]}{(E_f - E_i)^2 + (\hbar / \tau_{in})^2} \right\} \quad (۳-۴)$$

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} = \frac{1}{2 n_r^2 \varepsilon_0} |M_{fi}|^2 \frac{m^* k_B T}{L_{eff} \pi \hbar^2} \ln \left[\frac{1 + \exp \{ (E_F - E_i) / k_B T \}}{1 + \exp \{ (E_F - E_f) / k_B T \}} \right] \times \frac{(E_f - E_i + \hbar \omega)}{(E_f - E_i + \hbar \omega)^2 + (\hbar / \tau_{in})^2} \quad (۴-۴)$$

¹ Intersubband abroptions

$$\frac{\Delta n^{(3)}(\omega)}{n_r} = -\frac{\mu c}{4n_r^3 \varepsilon_0} |M_{fi}|^2 \frac{m^* k_B T}{L_{eff} \pi \hbar^2} \ln \left[\frac{1 + \exp\{(E_F - E_i)/k_B T\}}{1 + \exp\{(E_F - E_f)/k_B T\}} \right] \times \frac{I}{[(E_f - E_i + \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2]^2} \times \left\{ 4(E_f - E_i - \hbar\omega) |M_{fi}|^2 - \frac{|M_{ff} - M_{ii}|^2}{(E_f - E_i)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \left[(E_f - E_i - \hbar\omega) [(E_f - E_i)(E_f - E_i - \hbar\omega) - (\hbar/\tau_{in})^2] - (\hbar/\tau_{in})^2 [2(E_f - E_i) - \hbar\omega] \right] \right\} \quad (5-4)$$

در این مجموعه روابط I شدت اپتیکی میدان الکترومغناطیسی تحریکی با فرکانس E_i ، E_F ، ω به ترتیب معرف انرژی فرمی، تراز انرژی کوانتیده ابتدایی و تراز انرژی کوانتیده نهایی می باشند. همچنین μ ، k_B ، c ، L_{eff} ، n_r و τ_{in} به ترتیب نفوذپذیری، ثابت بولتزمن، سرعت نور، طول فضایی موثر الکترون، ضریب شکست و زمان واهلش بین زیر تراز¹ (که در اینجا برابر 0.14ps در نظر گرفته شده است [۱۵۰]) می باشند. در این معادلات ضرایب M_{fi} عناصر ماتریس دوقطبی هستند که بصورت زیر تعریف می شود [۱۴۹]:

$$M_{fi} = \int \phi_f^*(z) |e| z \phi(z) dz \quad (6-4)$$

ضریب شکست و جذب کلی نیز بطور زیر تعریف می شود:

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n_r} = \frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} + \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r} \quad (7-4)$$

$$\alpha(\omega, I) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I) \quad (8-4)$$

قدرت نوسان گندگی، که نمایانگر قدرت یک گذار نوعی بین زیرترازهای n و m، می باشد نیز از رابطه زیر بدست می آید:

$$f_{nm} = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E_n - E_m) \int \phi_n^*(z) z \phi(z)_m dz \quad (9-4)$$

برای محاسبه انرژی فرمی روشهای مختلفی ارائه شده است. از آن جمله می توان به شرط خنثایی بار [۱۵۱] یا بهنجارش بر حسب چگالی حالات [۱۵۲] اشاره نمود. در این مطالعه از رابطه چگالی الکترونی دو بعدی که بصورت زیر تعریف می شود استفاده شده است [۱۵۳]:

¹ intersubband relaxation time

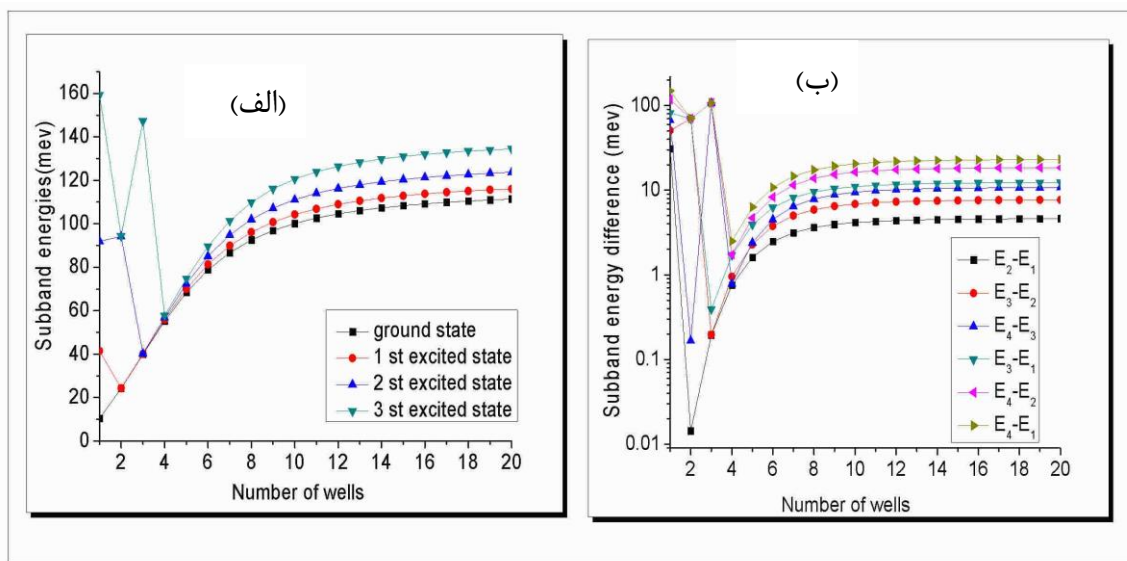
$$n^{2D} = \sum_{j=1}^n n_j^{2D} = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_{j=1}^n \ln(1 + \exp((E_F - E_j)/k_B T)) \quad (۱۰-۴)$$

در این رابطه j و n شماره های زیرترازها و تعداد حالات مقید را نشان می دهد. در این محاسبه از چگالی الکترونی در دمای ۷۷ درجه کلوین که برابر $n^{2D} = 3.0 \times 10^{16} \text{ [۱۵۰]}$ است استفاده شده است. همچنین فرض کرده ایم که $m = 0.067m_0$, $V_{\text{conf}} = 228 \text{ meV}$, $I_{\text{eff}} = 600 \text{ A}^\circ$, $n_r = 3.2$ و شدت تابش I برابر $0.3 \times 10^{10} \text{ wat/m}^2$ می باشد.

۳-۴ نتایج و بحث

۱-۳-۴ بررسی خواص نوری چاههای کوانتومی چندگانه $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$

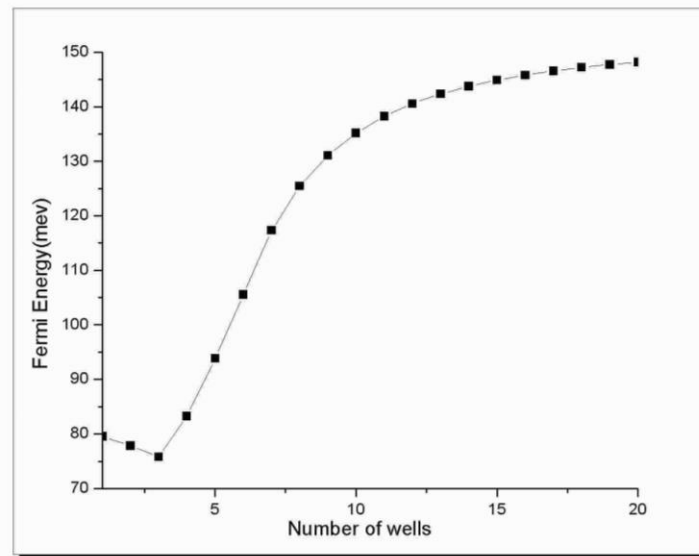
دانستن ویژه انرژیها و ویژه توابع وابسته به آنها در بررسی خواص خطی و غیر خطی نوری، نظم مغناطیسی، رسانش الکتریکی و تعدادی از ویژگیهای فیزیکی دیگر نقشی اساسی دارد. لذا به بررسی آنها می پردازیم. در این بخش ابتدا اثر تعداد چاههای کوانتومی (تا ۲۰ چاه) روی انرژی حالت پایه تعدادی از حالات برانگیخته و همچنین انرژی های گذارهای چاههای کوانتومی چندگانه با طول موثر ثابت ۶۰ نانومتر بررسی شده و نتایج این بررسی در شکلهای ۴-۳-الف و ب نشان داده شده است. همانطور که در شکل دیده می شود با افزایش تعداد چاههای کوانتومی یک رفتار یکنوای افزایشی برای انرژی زیر نوارها و همچنین انرژی های گذار وجود دارد. با افزایش تعداد چاهها انرژی زیر نوارها افزایش می یابد. این افزایش برای تغییرات تعداد چاه از ۱ تا ۱۰ شدیدتر است و با افزایش بیشتر تعداد چاهها این آهنگ کند می شود و به نظر می رسد به وضعیت اشباع انرژی نزدیک می شویم. هنگامی که n چاه کوانتومی جفت شده باشیم (چاه کوانتومی چندگانه) آنگاه یک ویژگی سیستم آن است که هر تراز دارای تبهگنی n گانه می باشد [۱۵۴]. نتایج این بررسی نشان می دهد هنگامی که تعداد چاههای کوانتومی کمتر از ۴ است به تعداد این چاهها تبهگنی مشاهده می گردد. اما با افزایش بیشتر تعداد چاه ها تبهگنی برداشته شده و چاهها شروع به جفت شدن می کنند. در این صورت یک ابرشبکه ایجاد می شود.



شکل ۳-۳ اثر تعداد چاهها روی الف: انرژی زیر نوارها و ب: انرژی های گذار

از آنجایی که انرژی های گذار بین زیرترازی نقش مهمی در خواص نوری ماده ایفا می کنند لذا رفتار بعضی از این گذارها بررسی و نتایج آن در شکل ۴-۳-ب نشان داده شده است. این نمودار بصورت نیمه لگاریتمی رسم شده است تا شکل از وضوح بهتری برخوردار باشد و فواصل بهتر دیده شوند. به دلیل اینکه محاسبات انجام شده در این بخش از کار محاسبات در مرکز منطقه بریلوئن انجام شده است (مواد مورد بررسی در ایجا گاف مستقیم دارند) بنابراین گذارهای رسم شده مجاز می باشند [۱۵۵].

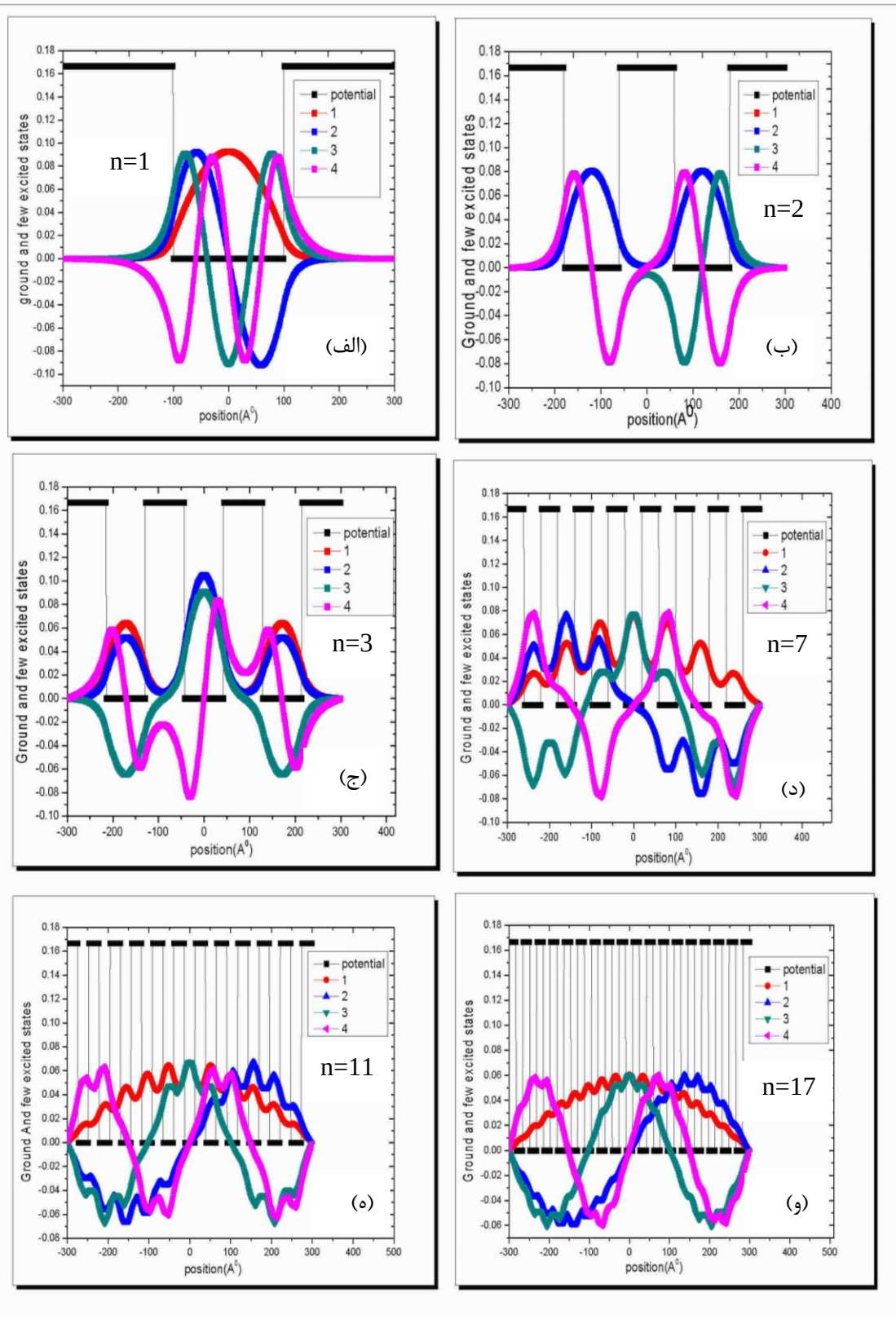
به منظور بررسی ضرایب جذب و شکست سیستم بایستی انرژی فرمی محاسبه شود. بر این اساس اثر تعداد چاهها روی انرژی فرمی بررسی شده است. نتیجه این بررسی در شکل ۴-۴ نشان داده شده است. این بررسی نشان می دهد که با افزایش تعداد چاه ها انرژی فرمی افزایش می یابد و تا ۱۰ چاه این افزایش شدید است (در تعداد چاه ۱۰ مقدار انرژی فرمی به ۸۵٪ مقدار ماکزیمم خود می رسد). با افزایش بیشتر تعداد چاه ها (تا ۲۰ چاه) نرخ افزایش کند شده و نمودار تقریباً به حالت اشباع می رسد.



شکل ۳-۴ اثر تعداد چاهها روی انرژی فرمی.

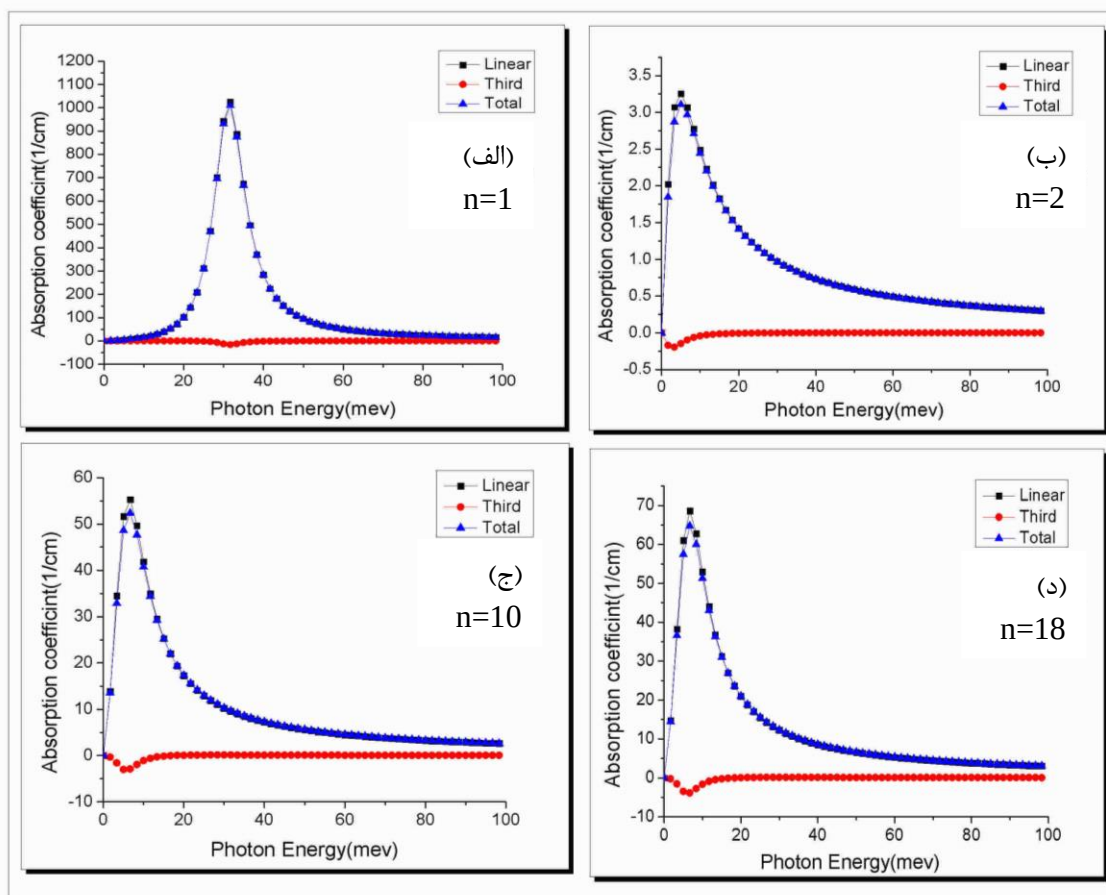
با توجه به رابطه ۴-۹ و شکل ۴-۳ الف این رفتار قابل انتظار می باشد. همانطور که شکل ۴-۳-الف نشان می دهد با افزایش تعداد چاهها انرژی زیرترازها افزایش می یابد و چون باید طرفین رابطه ۴-۱۰ همچنان برابر بمانند لذا بایستی انرژی فرمی نیز تغییراتی شبیه تغییرات انرژی زیر ترازها داشته باشد.

به منظور بررسی احتمال حضور الکترون در چاه کوانتومی، با افزایش تعداد چاه موقعیت توابع موج وابسته به آنها برای حالت‌های پایه و برانگیخته اول تا سوم بررسی شده اند. نتایج این بررسی در شکل ۴-۵ نشان داده شده است. همانطور که در ۴-۵-الف دیده می شود در چاه کوانتومی یگانه تابع موج تقریباً در محدوده مرکز چاه مقید است. با افزایش تعداد چاههای کوانتومی (کاهش ابعاد چاه) توابع موج و به تبع آن احتمال یافتن الکترون در کل محدوده سیستم (L_{eff}) توزیع می شود. رفتار کیفی شکل ۴-۵-الف و ۴-۵-و با هم یکسان (ولی شکل ۴-۵-و کمی افت و خیز دارد). در حقیقت با افزایش تعداد چاه به سیستم ۱۷ چاه، چاهی مشابه یک چاه کوانتومی بینهایت باعرض L_{eff} تولید شده است.



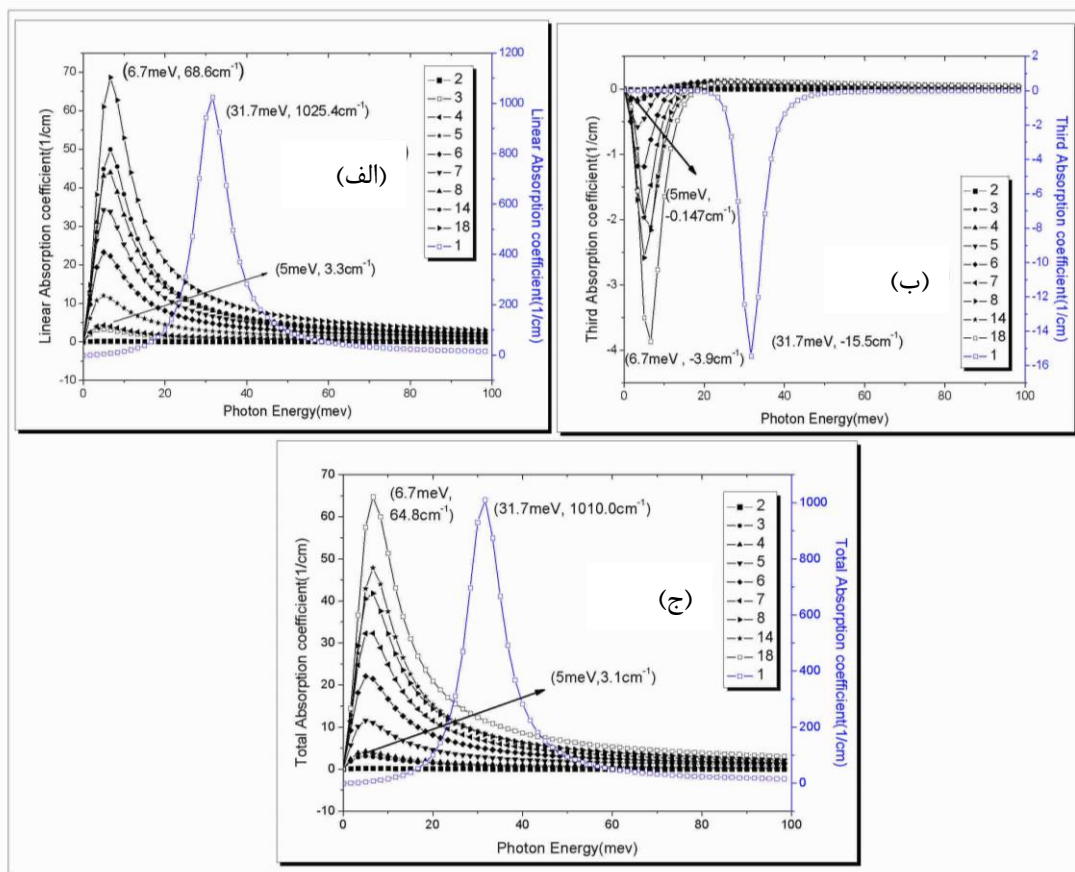
شکل ۳-۵ اثر تعداد چاه روی موقعیت ۴ تابع موج حالت پایین سیستم .

در ادامه برای محاسبه خواص نوری سیستم مورد نظر، ضرایب جذب آنها (خطی، غیر خطی و کل) محاسبه شده اند. نتایج این بررسی برای گذار های دو به یک (حالت پایه به اولین حالت برانگیخته) سیستم شامل ۱، ۲، ۱۰ و ۱۸ چاه کوانتومی در شکلهای ۴-۶-الف تا ۴-۶-د نشان داده شده است.



شکل ۳-۶ ضریب جذب برای ۴ تعداد چاه مختلف ۱ و ۳ و ۱۰ و ۱۸.

همانطور که در این شکل ها دیده می شود سیستم های شامل یک و دو چاه کوانتومی به ترتیب ماکزیمم و مینیمم مقدار ضریب جذب را دارند. در واقع میزان جذب از چاه یگانه به دوگانه کاهش قابل توجهی از خود نشان می دهد و سپس با افزایش بیشتر تعداد چاهها این ضریب مجددا افزایش می یابد. نکته دیگر که در این شکلهای دیده می شود این است که اثر جذب غیرخطی ناچیز است. همچنین قله های جذب سیستم ها با تغییر تعداد چاه جابجا می شوند. به منظور مقایسه شکلهای ۴-۷-الف تا ۴-۷-ج رسم شده اند.



شکل ۳-۷ نمودار ضرایب جذب بر حسب تعداد چاه. الف: ضریب جذب خطی ب: ضریب جذب غیر خطی ج: ضریب جذب کل

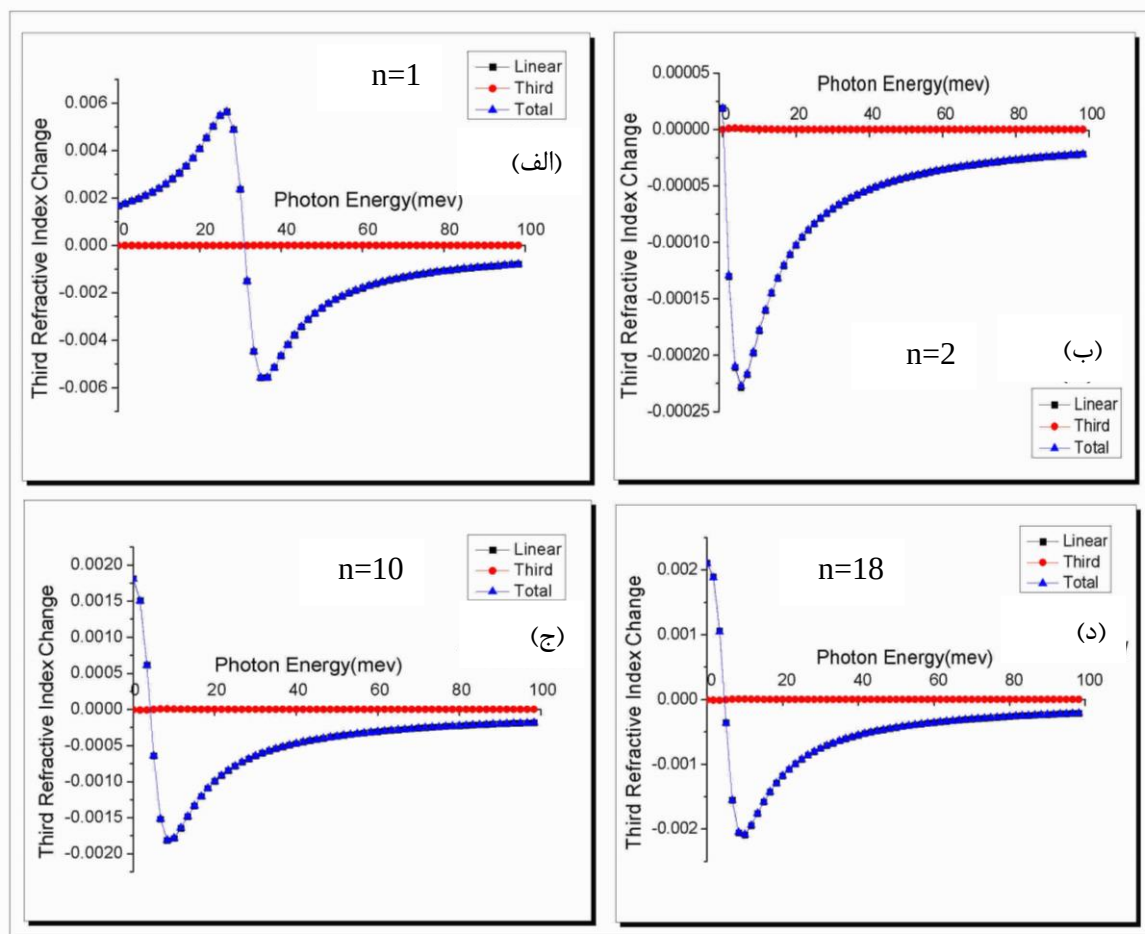
نتایج بدست آمده نشان می دهد که با افزایش تعداد چاه کوانتومی ضرایب جذب خطی، غیر خطی و کل افزایش می یابند. بررسی موقعیت قله های جذب نشان می دهد که با افزایش تعداد چاه ها از یک به دو، یک جایجایی قرمز^۱ قابل توجه در حدود ۲۷ میلی الکترون ولت در موقعیت قله های جذب اتفاق می افتد. سپس با افزایش تعداد چاه از ۲ به ۱۸ یک جایجایی آبی^۲ کوچک در حدود ۱/۷ میلی الکترون ولت در موقعیت قله های جذب مشاهده می شود. رفتار مشاهده شده با رفتار انرژی های گذار در شکل ۴-۳ ب در توافق می باشد.

در ادامه این کار رفتار ضریب شکست با تغییر تعداد چاه کوانتومی بررسی شده است. نتایج این بررسی روی ضریب شکست خطی، غیر خطی و کل برای سیستم نوعی با تعداد چاه تعداد چاه ۱ و

¹ Red shift

² Blue shift

۳ و ۱۰ و ۱۸ در شکل‌های ۴-۸-الف تا ۴-۸-د بررسی شده است. در این محاسبات گذارهای E_2-E_1 مورد بررسی قرار گرفته اند. مقایسه این نتایج نشان می دهد که ضرایب شکست در تغییر تعداد چاه از یک به دو کاهش و با افزایش بیشتر تعداد چاهها افزایش می یابد.

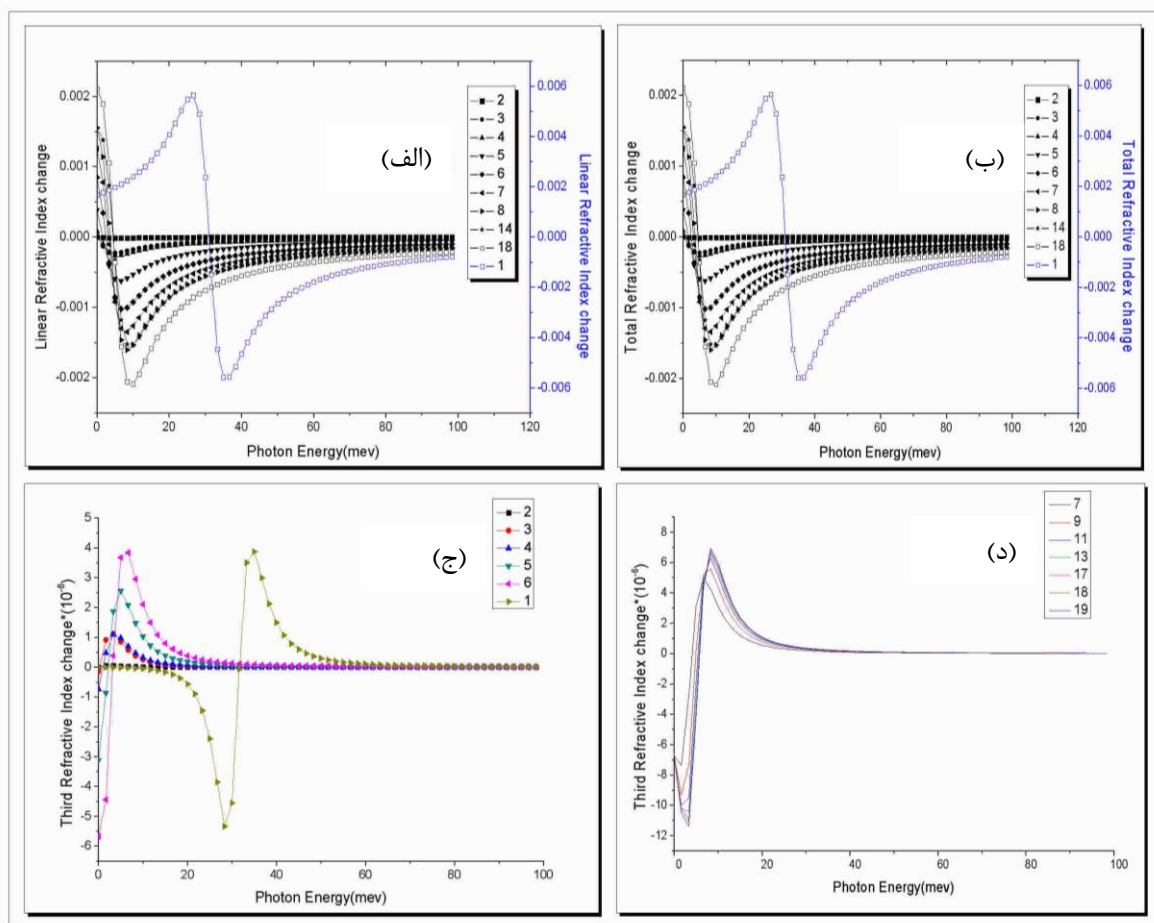


شکل ۳-۸ اثر تعداد چاه روی رفتار ضریب شکست خطی، غیر خطی و کل چاههای کوانتومی چند گانه با ۱ و ۳ و ۱۰ و ۱۸ چاه

سیستم چاه کوانتومی دو گانه حد اقل ضریب شکست را نشان می دهد. تغییر ضریب شکست غیر خطی برای همه سیستم ها ناچیز است.

برای مشاهده بهتر، رفتار ضریب شکست خطی، غیر خطی و کل با تغییر تعداد چاههای کوانتومی در شکل های ۴-۹-الف تا ۴-۹-ج رسم شده اند. برای شکست مرتبه ۳ دو رژیم وجود دارد. برای سیستم های با تعداد چاه کمتر از ۱۰ (به غیر از چاه یگانه)، ضریب شکست ابتدا افزایش یافته و بیشینه خود می رسد و سپس به مقدار صفر کاهش می یابد. اما در سیستم های شامل بیشتر از

۱۰ چاه، ضریب شکست ابتدا به کمینه خود رسیده و سپس به بیشینه ای افزایش می یابد و پس از آن مجدداً به مقدار صفر کاهش می یابد.



شکل ۳-۹ اثر تعداد چاه روی (الف): ضریب شکست خطی، (ب): ضریب شکست کل و (ج) و (د): ضریب شکست غیر خطی چاههای کوانتومی چند گانه. در قسمت (ج) ضریب ۱۰۶ برای چاه های به غیر از چاه کوانتومی یگانه می باشد.

۳-۲ بررسی خواص نوری چاههای کوانتومی چندگانه GaN/AlN در میدان

مغناطیسی خارجی

بررسی خواص نوری چاه کوانتومی چندگانه GaN/AlN در حضور یک میدان مغناطیسی خارجی در راستای رشد یکی دیگر از کارهایی است که در این رساله به آن پرداخته ایم. ماده ای که در بخش قبل مورد بررسی قرار داده بودیم دارای گسستگی نواری نواری رسانش ۲۲۸ میلی الکترون بود که کوچک می باشد. اکنون ساختار چاه کوانتومی GaN/AlN که جابجایی نواری بزرگی در حدود

۱۲۸۰ میلی الکترون ولت دارد را مورد بررسی قرار می دهیم. معمولا اعمال میدان مغناطیسی به عنوان یک ابزار انعطاف پذیر برای بررسی ویژگیهای مختلف ساختارهای کوانتومی مورد استفاده قرار می گیرد. اعمال میدان مغناطیسی می تواند پتانسیل محصور سازی سیستم را تغییر داده و در نتیجه باعث تغییر ساختار نواری نمونه مورد مطالعه گردد. تغییر ساختار نواری می تواند ویژگیهای فیزیکی سیستم مورد مطالعه را به طور قابل توجهی تغییر دهد. پارامترهای مورد استفاده در این بررسی در جدول ۴-۳-۱ آمده است.

جدول ۴-۳-۱: پارامترهای مورد استفاده در بررسی چاههای کوانتومی GaN/AlN.

شدت موج فرودی I	n_r	n_{2D}	m^*/m_0	$V_{conf}(meV)$
$0.3 \times 10^{10} \text{ Wat/m}^2$	$3/2$	3.0×10^{16}	0.15	۱۲۸۲

در جدول ۴-۳-۲ انرژی سه پایین ترین زیرتراز چاه کوانتومی چندگانه GaN/AlN ($1 \leq n \leq 6$) گزارش شده است.

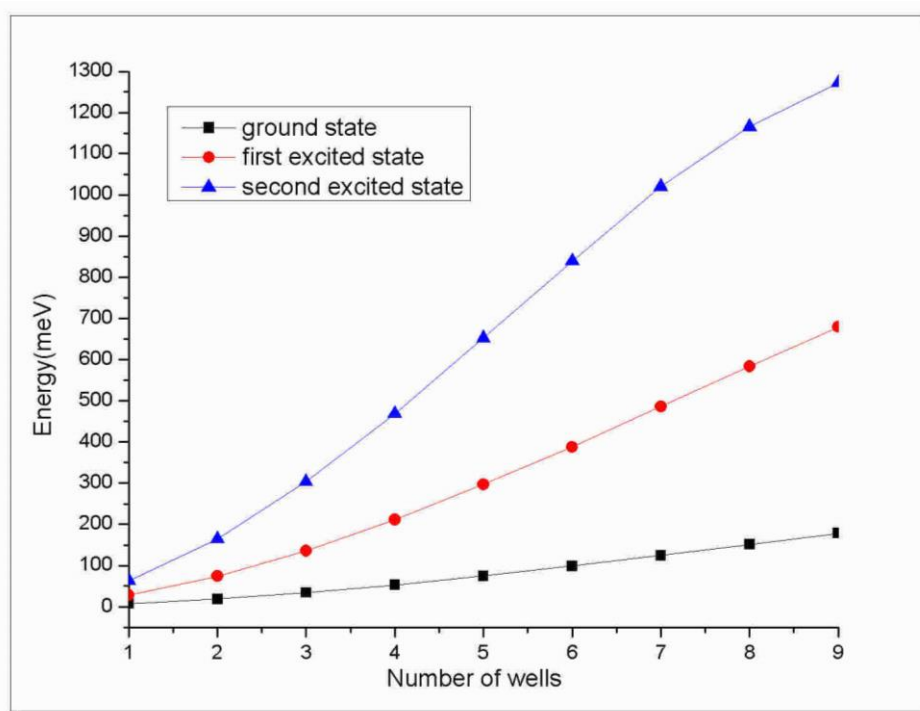
جدول ۴-۳-۲: انرژی سه پایین ترین زیرتراز چاه کوانتومی چندگانه GaN/AlN بر حسب میلی الکترون ولت

($1 \leq n \leq 6$) در غیاب میدان مغناطیسی.

Well Number \ State Number	n=1	n=2	n=3	n=4	n=5	n=6
1	7.10416	18.53108, 18.53121	34.16282, 34.16295, 34.16308,	53.19717, 53.1973, 53.19743, 53.19757	74.97053, 74.97068, 74.97084, 74.97099, 74.97115	98.924054, 98.926557, 98.930244, 98.935504, 98.937903, 98.939518,
2	28.40768	74.03123, 74.03136	136.2243, 136.22443, 136.22456	211.48277, 211.4829, 211.48304, 211.48326	296.7366, 296.74064, 296.7459, 296.75123, 296.75513	389.201327, 389.228597, 389.268016, 389.311785, 389.351258, 389.378533,
3	63.88312	166.20422, 166.20435	304.75911, 304.75924, 304.75937	470.20327, 470.20555, 470.20828, 470.21056	653.08784, 653.13346, 653.1958, 653.25818, 653.30388	842.235725, 842.615988, 843.168158, 843.784772, 844.343754, 844.732513,

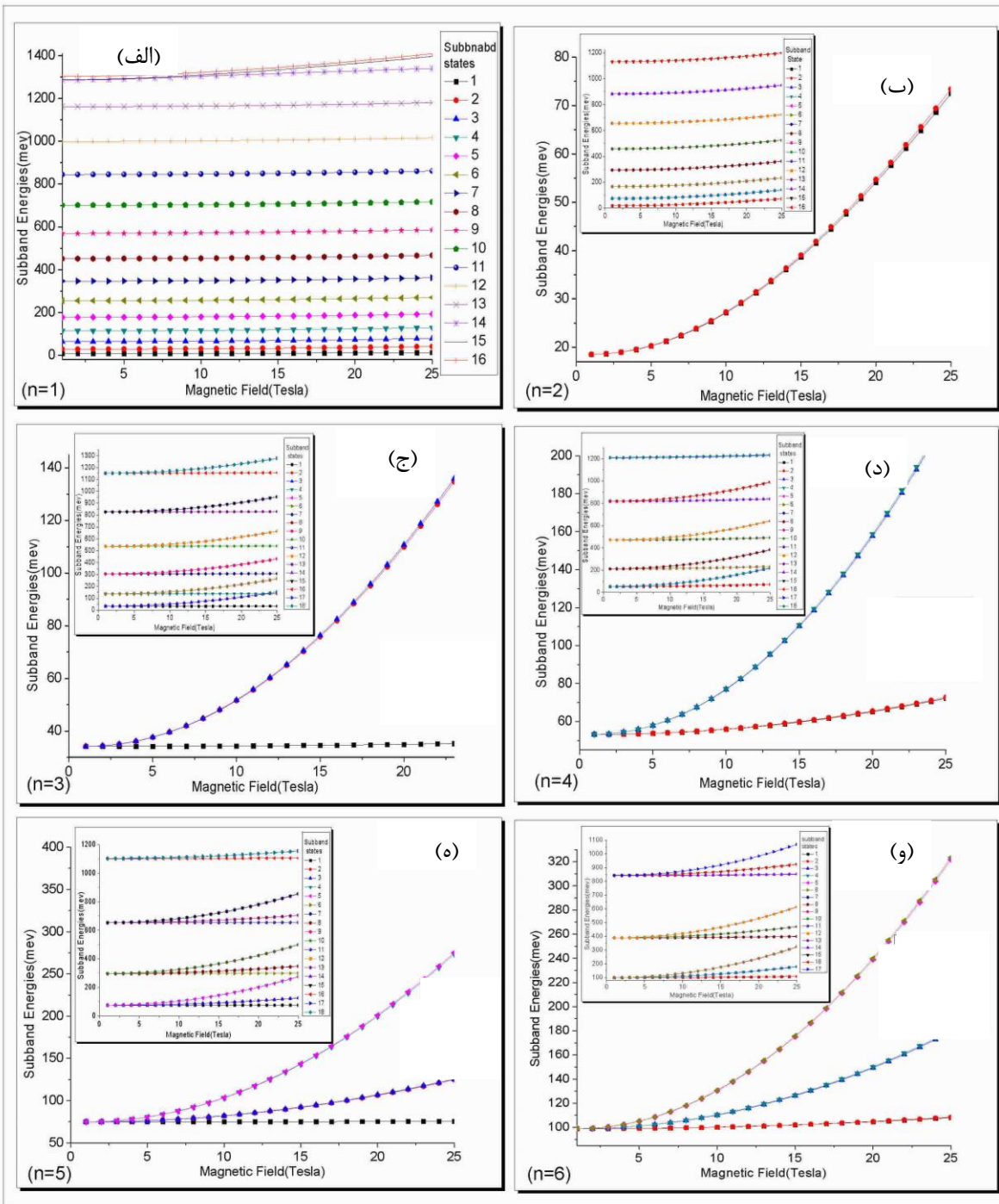
بررسی این مقادیر نشان می دهد که برای تعداد چاههای کمتر از ۵ تبهگنی n گانه وجود دارد در حالیکه با افزایش بیشتر تعداد چاه این تبهگنی شکسته شده و سیستم چاه کوانتومی چندگانه به یک ابر شبکه تبدیل می شود (شروع تشکیل ریزنوارها).

در شکل ۴-۱۰ چگونگی تغییرات انرژی زیر ترازها برای سه حالت پایه، برانگیخته اول و دوم با افزایش تعداد چاهها ($1 \leq n \leq 9$) نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود با افزایش تعداد چاهها (و در نتیجه کاهش عمق چاه) انرژی زیرترازها بطور یکنوا افزایش می یابد.



شکل ۳-۱۰ اثر تعداد چاهها روی انرژی زیر ترازهای چاههای کوانتومی چند گانه GaN/AlN با عرض کلی ثابت ۶۰ نانومتر.

در ادامه این کار انرژی زیرترازهای چاه کوانتومی مفروض در حضور میدان مغناطیسی (صفر تا ۲۵ تسلا) محاسبه شده اند. نتیجه این محاسبات در نمودارهای شکل ۴-۱۱ الف تا ۴-۱۱ و آمده اند. همانطور که در شکل ۴-۱۱ الف دیده می شود برای چاه کوانتومی یگانه با افزایش میدان مغناطیسی تغییر محسوسی در انرژی زیرترازها وجود ندارد. در چاه کوانتومی دوگانه در حالیکه یک تبهگنی دوگانه در انرژی تمام زیرترازها وجود دارد افزایش میدان مغناطیسی فقط باعث افزایش انرژی زیرترازها شده است.

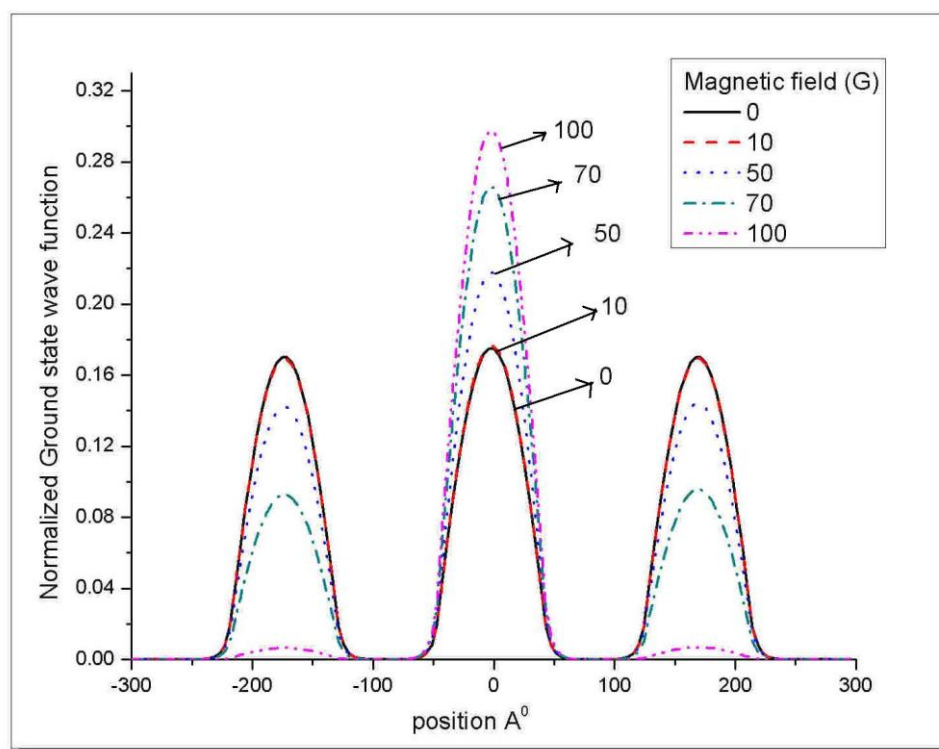


شکل ۳-۱۱ اثر میدان مغناطیسی خارجی (در راستای رشد) روی انرژی زیر ترازهای چاههای کوانتومی چند گانه با تعداد چاه مختلف.

در چاه کوانتومی سه گانه با افزایش میدان مغناطیسی تا حدود سه تسلا تبهگنی زیر ترازها شکسته می شود. به گونه ای که یک تراز تبهگن دوگانه و یک تراز غیر تبهگن بوجود می آید. همچنین انرژی تراز تبهگن با افزایش میدان مغناطیسی افزایش قابل توجهی می یابد. در چاه کوانتومی چهارگانه، در اثر میدان مغناطیسی تبهگنی چهارگانه شکسته شده و دو زیر تراز با تبهگنی دوگانه

تولید می شود. در چاه کوانتومی پنج گانه با افزایش میدان مغناطیسی تا حدود سه تسلا، تراز تبهگن پنج گانه به دو زیر تراز تبهگن دوگانه و یک تراز غیر تبهگن می شکند. این روند با افزایش تعداد چاههای کوانتومی ادامه می یابد. همچنین با افزایش میدان مغناطیسی تا ۲۵ تسلا و بیشتر مشاهده می کنیم که تقاطع بین زیرترازها نیز می تواند رخ بدهد.

در شکل ۴-۱۲ اثر میدان مغناطیسی روی تابع موج بهنجار شده حالت پایه یک چاه کوانتومی ۳ گانه نشان داده شده است.

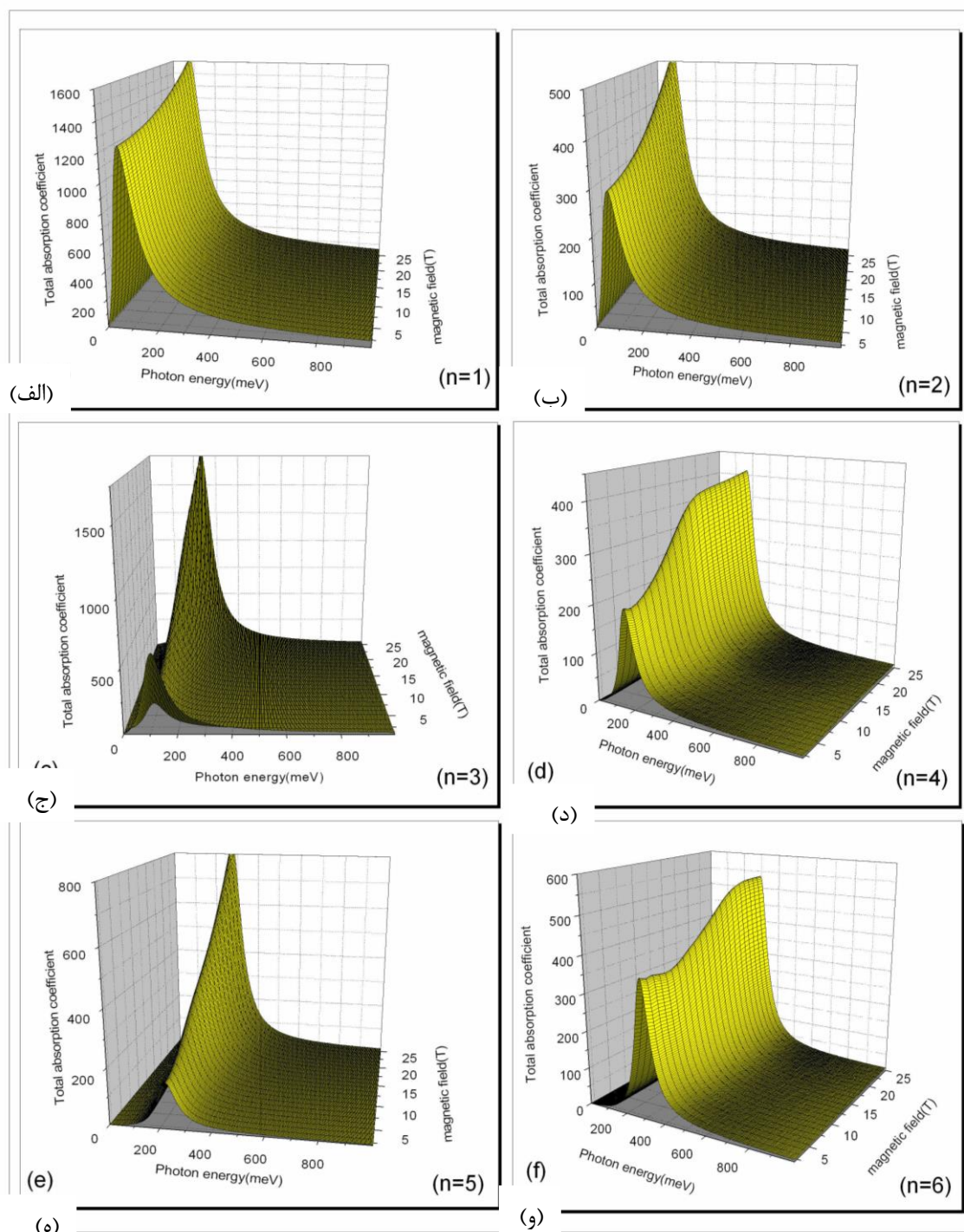


شکل ۳-۱۲ اثر میدان مغناطیسی روی جایگزیدگی تابع موج حالت پایه یک چاه کوانتومی سه گانه GaN/AlN.

این بررسی نشان می دهد که با اعمال و افزایش میدان مغناطیسی جایگزیدگی تابع موج بهنجار شده در چاه کوانتومی وسطی افزایش و در چاههای طرفین این چاه کاهش می یابد. این رفتار بدلیل سهموی بودن جمله میدان مغناطیسی (معادله ۲-۲) می باشد.

در راستای بررسی خواص نوری نمونه های مورد نظر ضرایب جذب آنها بر حسب انرژی فوتون فرودی و همچنین میدان مغناطیسی اعمالی به ازای تعداد چاه های مختلف ($1 \leq n \leq 6$) محاسبه شده اند. نتایج این بررسی در شکلهای ۴-۱۳ الف تا ۴-۱۳ و نشان داده شده اند. مقایسه

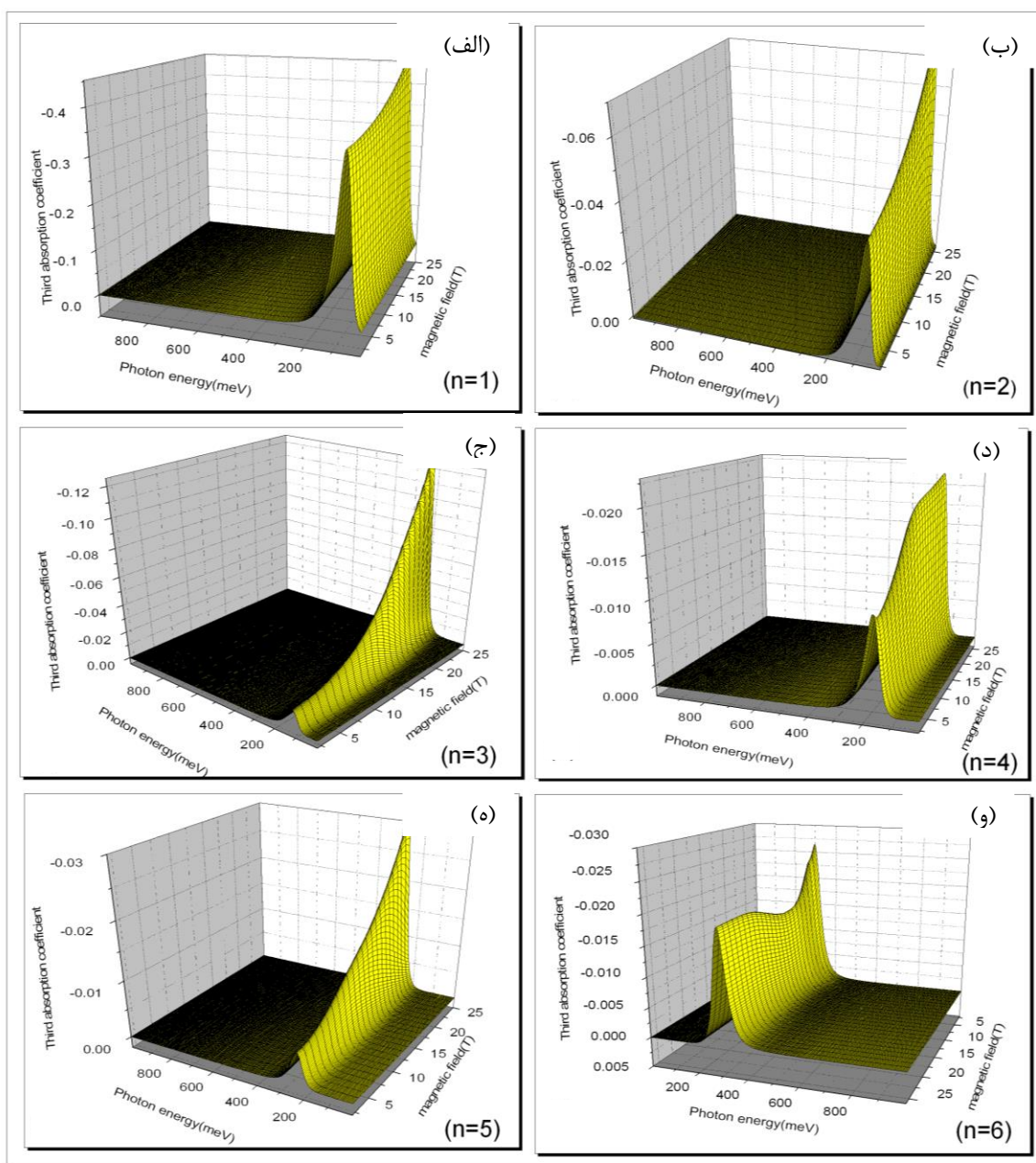
نمودارهای جذب سه بعدی نشان می دهد که بطور کلی با افزایش میدان مغناطیسی شدت جذب افزایش می یابد.



شکل ۳-۱۳ نمودار تغییرات ضریب جذب کل بر حسب انرژی فوتون فرودی و میدان مغناطیسی اعمالی برای چاههای کوانتومی n گانه GaN/AlN.

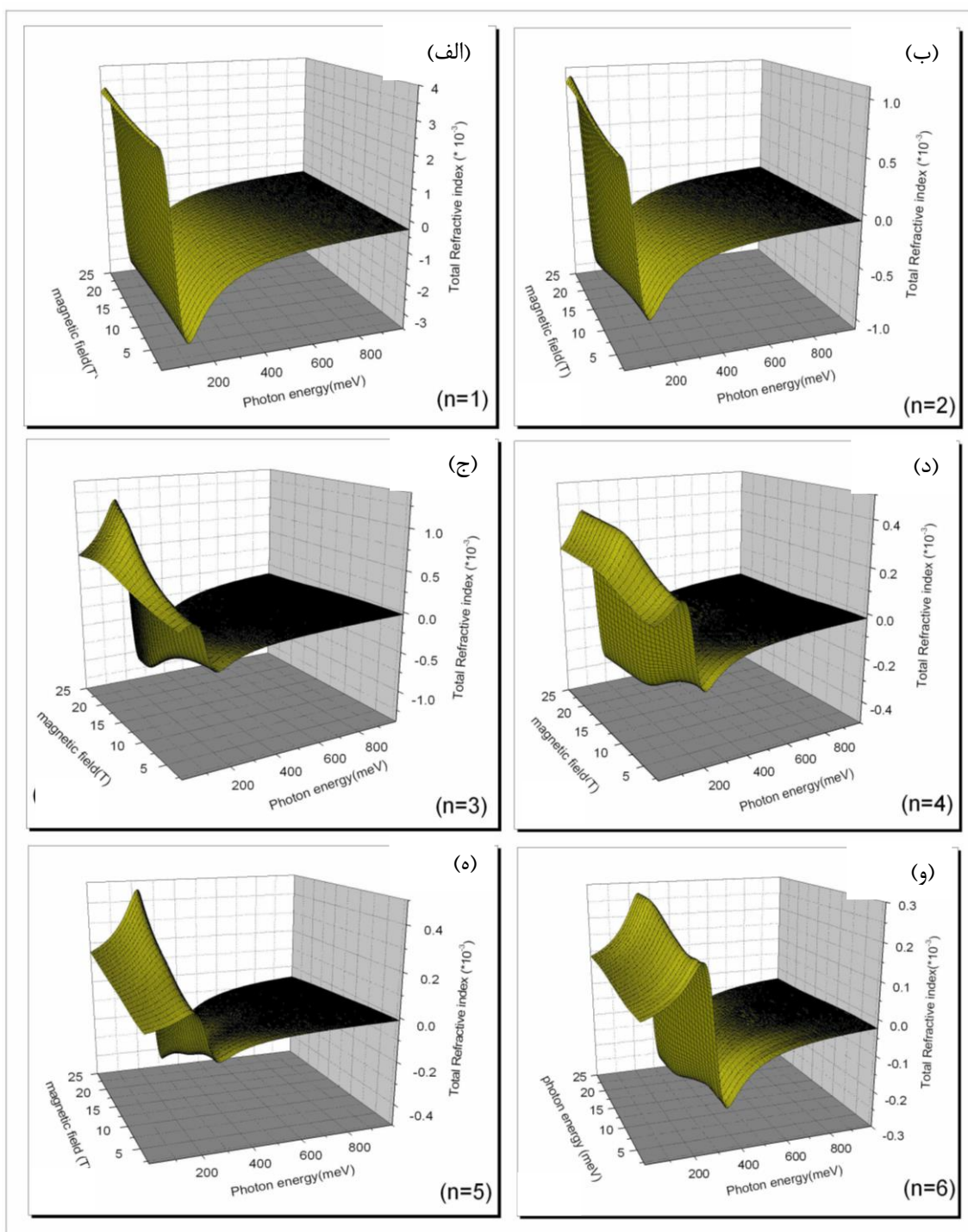
شیب این افزایش در چاه های دوگانه در مقایسه با بقیه چاهها شدیدتر است. به عبارت دیگر پاسخ این نمونه به افزایش میدان مغناطیسی از سایر نمونه ها سریعتر است. همچنین مشاهده می شود که نمونه های با تعداد چاه فرد در حضور میدان مغناطیسی، ضرایب جذب بزرگتری از خود نشان می دهند. در بین نمونه ها، رفتار ضرایب جذب چاههای کوانتومی چهار و شش گانه در حضور میدان مغناطیسی اعمالی با نمونه های دیگر متفاوت است. در این نمونه ها به ازای میدانهای مغناطیسی اعمالی بزرگ (۲۰ تا ۲۵ تسلا) تغییرات ضرایب جذب تقریباً به صفر کاهش می یابد. از سوی دیگر مقایسه موقعیت قله های جذب در این نمونه ها نشان می دهد که با افزایش تعداد چاههای کوانتومی یک جابجایی آبی در موقعیت قله های جذب ایجاد می شود. نکته آخر اینکه تغییرات ضرایب جذب با افزایش میدان مغناطیسی در چاه کوانتومی یگانه از سایر نمونه ها کندتر می باشد.

در بررسی انجام شده روی ضرایب جذب، ضرایب جذب مرتبه ۳ نیز محاسبه شدند تا اثر آنها روی ضریب جذب کل مشخص گردد. در شکلهای ۴-۱۴ نمونه ای از رفتار ضرایب جذب مرتبه ۳ برای چاه کوانتومی سه گانه در حضور میدان مغناطیسی نشان داده شده است. مقایسه نمودارها نشان می دهد که رفتار ضرایب جذب مرتبه ۳ شبیه ضرایب جذب خطی بوده لیکن مقادیر آن بسیار کوچک می باشد. بنابراین تاثیر چندانی روی جذب کل نخواهند داشت.



شکل ۳-۱۴ تغییرات ضریب جذب مرتبه چاههای کوانتومی n گانه بر حسب انرژی فوتون فرودی و میدان مغناطیسی اعمالی.

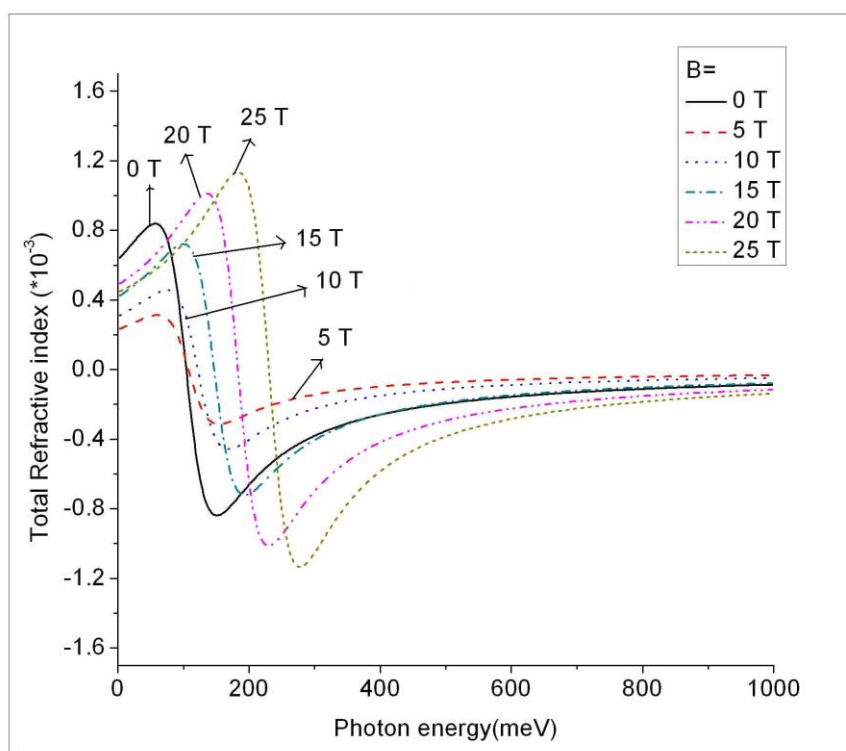
پارامتر دیگری که در بررسی های نوری این نمونه ها بررسی گردید ضرایب شکست نمونه ها می باشد. در شکل ۴-۱۵ الف تا ۴-۱۵ و اثر افزایش تعداد چاه کوانتومی و میدان مغناطیسی روی ضریب شکست کل نمونه ها نشان داده شده است.



شکل ۳-۱۵ نمودار تغییرات ضریب شکست کل بر حسب انرژی فوتون فرودی و میدان مغناطیسی اعمالی برای چاههای کوانتومی n گانه GaN/AlN

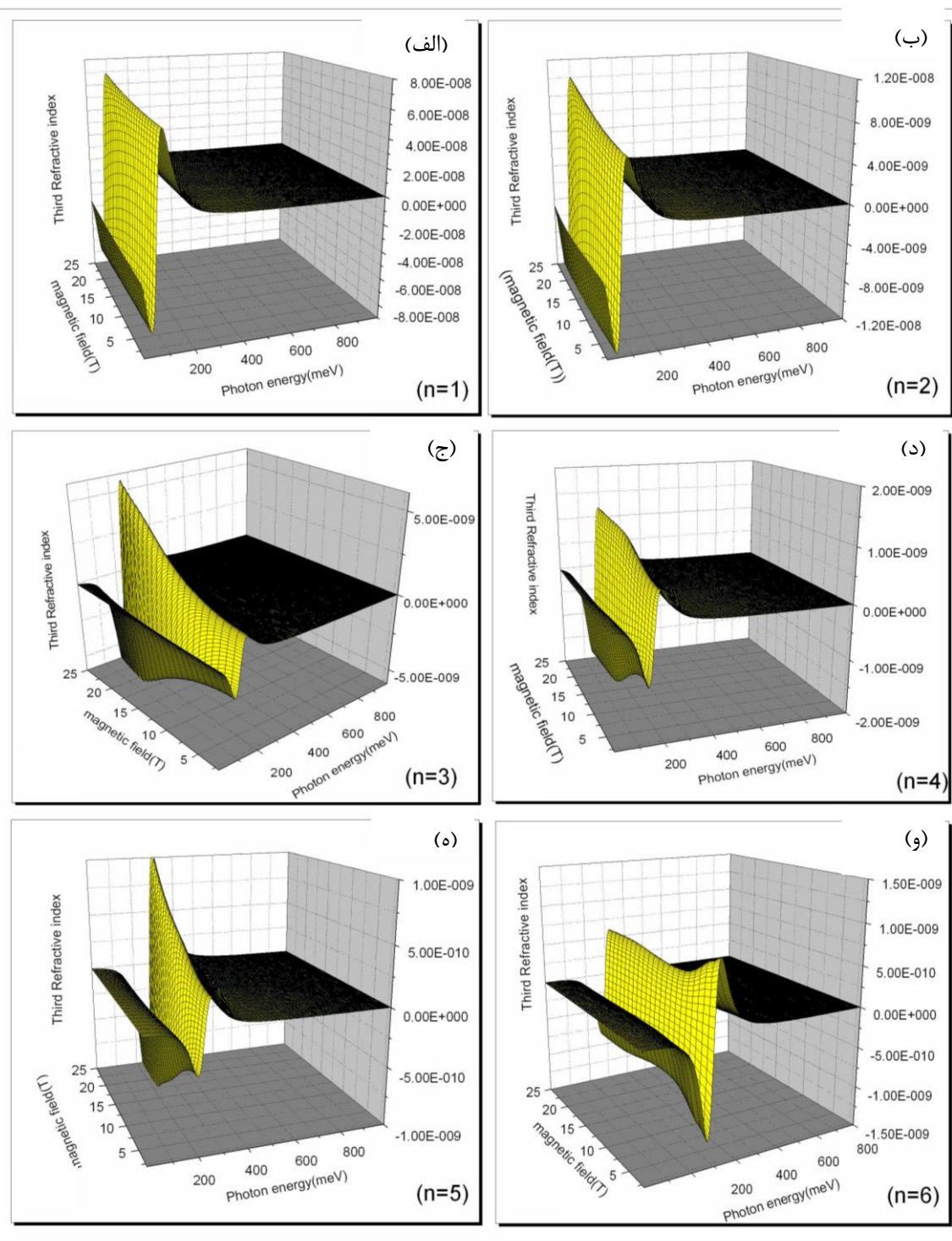
همانطور که در این شکلها دیده می شود رفتار ضریب شکست در همه نمونه ها تقریباً یکسان است. یعنی با افزایش انرژی فوتون فرودی تا حدود ۳۰۰ میلی الکترون ولت ابتدا یک دره ایجاد می شود و سپس با افزایش بیشتر تا حدود یک الکترون ولت ضریب شکست تا یک مقدار تقریباً ثابت افزایش

می یابد. به منظور مشاهده آسانتر رفتار ضرایب شکست، نمودار دو بعدی تغییرات این کمیت بر حسب انرژی فوتون فرودی برای چاه کوانتومی سه گانه در شکل ۴-۱۶ رسم شده است. همانطور که در این شکل مشاهده می شود با افزایش میدان مغناطیسی قله ها و دره های ضریب شکست به سمت انرژی های بیشتر (جابجایی آبی) جابجا می شوند که این می تواند دلیل افزایش انرژی زیر ترازها در حضور میدان مغناطیسی اعمالی باشد.



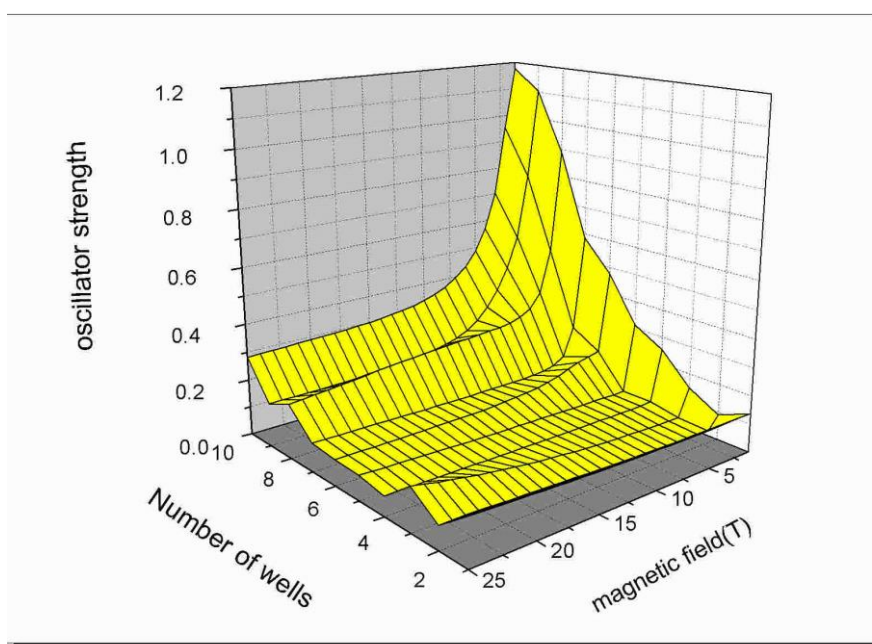
شکل ۳-۱۶ اثر میدان مغناطیسی روی ضریب شکست کل چاه کوانتومی سه گانه GaN/AlN.

در ادامه رفتار ضریب شکست مرتبه سوم بر حسب انرژی فوتون فرودی و میدان مغناطیسی اعمالی در نمونه های چاههای کوانتومی چندگانه مورد نظر نیز بررسی شد. نتایج این بررسی در شکل ۴-۱۷ الف تا ۴-۱۷ و نشان داده شده است. این بررسی نشان می دهد که اولاً رفتار ضریب شکست مرتبه سوم شبیه رفتار ضریب شکست خطی بوده و ثانياً مقادیر ضریب شکست بدست آمده بسیار کوچک است. بنابراین آثار آن در ضریب شکست کل بسیار ناچیز بوده و قابل صرف نظر کردن است.



شکل ۳-۱۷ اثر تعداد چاه کوانتومی و انرژی فوتون فرودی و میدان مغناطیسی روی ضریب شکست مرتبه سوم چاههای کوانتومی n گانه.

به منظور بررسی قدرت گذارهای بین زیرترازهای نمونه های مورد نظر کمیت بدون بعد قدرت نوسانگر^۱ بین گذارها نیز در ادامه این کار با استفاده از رابطه (۴-۹) محاسبه شد. در شکل ۴-۱۸ قدرت نوسانگر نوعی گذار ۲ (بر انگیخته اول) به ۱ (حالت پایه) بر حسب تعداد چاه کوانتومی و همچنین میدان مغناطیسی اعمالی نشان داده شده است.



شکل ۱۳- اثر تعداد چاه و میدان مغناطیسی روی شدت نوسانگر چاههای کوانتومی π گانه.

همانطور که در این شکل دیده می شود با افزایش میدان مغناطیسی اعمالی قدرت گذارها برای تمام چاههای کوانتومی افزایش می یابد. همچنین با افزایش تعداد چاهها، افزایش میدان مغناطیسی قدرت نوسانگر را بطور قابل توجهی افزایش می دهد. این رفتار در توافق با گزارش گروه لیو و همکاران می باشد [۱۵۶]. علت افزایش قدرت نوسانگر می تواند به دلیل افزایش انرژی گذار ۲ به ۱ با افزایش تعداد چاههای کوانتومی (عرض کل ثابت) و افزایش میدان مغناطیسی باشد.

نتیجه گیری

در این بخش با کمک روش تفاضل محدود معادله شرودینگر در تقریب جرم موثر با کمک تقریب توابع پوش برای یک سیستم چاه کوانتومی چندگانه حل شد و با کمک روش ماتریس چگالی

^۱ Oscillator strength

فشرده ویژگیهای نوری و ویژگیهای الکترونیکی مورد بررسی قرار گرفت. اثر تعداد چاهها روی انرژی زیر نوارها، انرژی های گذار، انرژی فرمی، تابع موج حالت پایین سیستم، ضرایب جذب خطی، غیر خطی و کل و همچنین ضریب شکست خطی، غیر خطی و کلی چاههای کوانتومی چند گانه به ازای تعداد چاههای مختلف و طول کلی ثابت مورد بررسی قرار گرفت. ساختار مورد بررسی در این بخش چاههای کوانتومی چندگانه GaN/AlN و AlGaAs/GaAs که به ترتیب جابجایی های نواری بسیار بزرگ و کوچکی دارند می باشد. به عنوان یک اثر خارجی از یک میدان مغناطیسی استفاده شد. میدان مغناطیسی می تواند به عنوان یک ابزار انعطاف پذیر برای بهبود و یا تغییر ویژگی سیستم های مختلف مورد استفاده قرار گیرد. اثر میدان مغناطیسی اعمالی در راستای رشد روی انرژی زیر نوارها، تابع موج حالت پایه، قله های ضریب جذب خطی، غیر خطی و کل، ضرایب شکست خطی، غیر خطی و کل و شدت نوسانگر چاههای کوانتومی چند گانه با تعداد مختلف چاه و اثر تعداد چاهها روی انرژی زیر نوارهای چاههای کوانتومی چند گانه و همچنین اثر میدان مغناطیسی و تعداد چاهها روی جابجایی به قرمز یا آبی قله های جذبی و شکافتگی ترازهای چاه کوانتومی n گانه به $n/2$ تراز دوبار تبهگن در اثر میدان مغناطیسی مورد بررسی قرار گرفت. در این بخش ۸۸۰ خط برنامه C++ روی روش تفاضل محدود بروش ماتریس چگالی فشرده نوشته شد.

فصل ۵: الگوریتم های تفاضل محدود،

ماتریس انتقال و مرز عبوری کوانتومی

برای بررسی : الف: ویژگیهای

مغناطیسی (فیلتر اسپینی)، ب: مطالعه

سازوکار تولید ریز نوار در ابر شبکه

های GaN/AlN و

$\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$

۵-۱ بررسی ریزنوارهای ابرشبکه های GaN/AlN با عرض موثر کلی ثابت

۵-۱-۱ مقدمه

یک ابرشبکه نقش مهمی در خواص ترابرد بازی می کند. یکی از مهمترین ویژگی های ابرشبکه ها در بررسی ترابرد کوانتومی^۱ تشکیل ریزنوار^۲ است که در دهه های اخیر مورد توجه قرار گرفته است [۱۱-۱۲]. در بررسی ویژگی های ریزنوار ها، ترابرد ریزنوارها^۳ [۱۵۷-۱۵۸] برای ریزنوارهای عریض [۱۵۹] و کم ضخامت [۱۶۰] مطالعه شده اند. امروزه ابرشبکه های تولید شده بر پایه ترکیبات نیمرسانای گروه III-N نظیر AlN/GaN نقش مهمی در ساخت قطعات نانو ساختاری نظیر ترانزیستورهای تونلی تشدید^۴ [۱۶۱]، لیزرهای آبخاری کوانتومی^۵ [۱۶۲] و آشکارسازها [۱۶۳] ایفا می کنند.

به منظور داشتن ابرشبکه هایی با ویژگیهای مورد نظر، بلوکهای اولیه مختلفی تا کنون بررسی شده اند که از بین آنها می توان به ابرشبکه های فیبوناچی^۶ [۱۶۴] و پاسکال^۷ [۱۶۵] اشاره کرد. اثر عرض چاه بر تشکیل ریزنوار نیز توسط گروه های تحقیقاتی مختلف بررسی شده است [۱۵۴ و ۲۷]. در این بخش انرژی ریزنوارها و همچنین ضرایب عبور برپایه روش ماتریس انتقال^۸ [۱۶۶] در ساختار کوانتومی چندگانه AlN/GaN با ضخامتهای کلی ۴۰، ۶۰ و ۱۰۰ نانومتر محاسبه و بررسی شده اند.

۵-۱-۲ رهیافت محاسبات

¹ Quantum transport

² Miniband

³ Miniband transport

⁴ Resonant tunneling transistor

⁵ Quantum cascade lasers

⁶ Fibonacci

⁷ Pascal

⁸ Transfer matrix method

عبور الکترونها از یک ساختار چاه کوانتومی نوعی (نظیر GaN/ALN در این مطالعه) را می توان با حل معادله شرودینگر با استفاده از تقریب جرم موثر و به کمک روش تابع پوش مورد بررسی قرار داد. هامیلتونی حاکم با رابطه زیر داده می شود:

$$\left(-\frac{P^2}{2m^*} + V(z) \right) \psi(z) = E \psi(z) \quad (1-5)$$

که در این رابطه m^* جرم موثر و $V(z)$ پتانسیل محصور سازی است. این پتانسیل با رابطه زیر تعریف می شود:

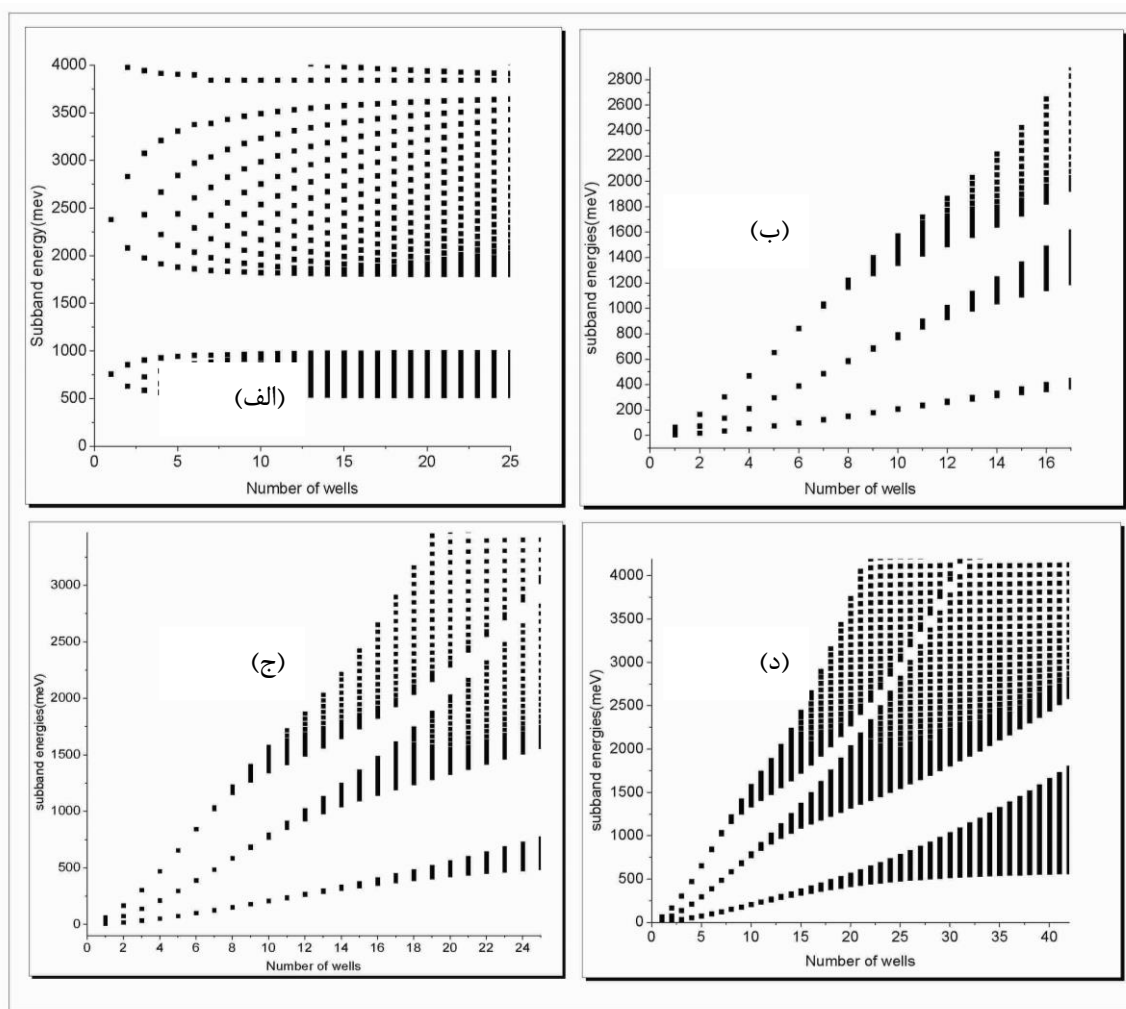
$$V(z) = \begin{cases} V_{conf} & i = 1, 3, \dots \\ 0 & i = 2, 4, \dots \end{cases} ; \quad \frac{i-1}{2N+1} L_{eff} < z < \frac{i}{2N+1} L_{eff} \quad (2-5)$$

که در این رابطه N تعداد چاهها، V_{conf} جابجایی نوار رسانش و i شماره چاه یا سد پتانسیل است. در اینجا معادله (1-5) را با کمک روش مشهور گسسته سازی [167] حل نموده ایم (بخش 3-1) که در ادامه نتایج آن مورد بررسی قرار گرفته است. مقادیر جرم موثر استفاده شده در این محاسبه برای GaN و AlN به ترتیب $m^* = 0.12m_e$ و $m^* = 0.48m_e$ بوده است [145].

5-1-3 نتایج و بحث:

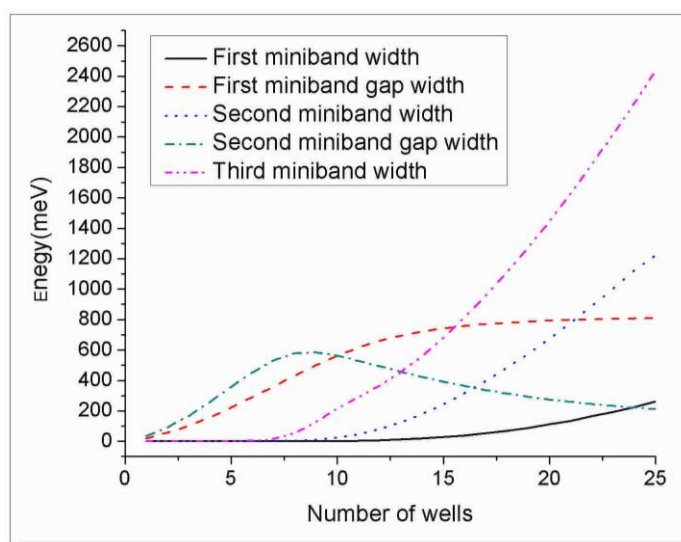
در این کار ابتدا انرژی ریزنوارها و همچنین تغییرات آنها بر حسب تعداد چاه کوانتومی چندگانه متقارن GaN/AlN با عرض کل ثابت 40، 60 و 100 نانومتر محاسبه و بررسی شده اند. نتایج این کار در شکل (1-5) نشان داده شده است. به منظور مقایسه، تغییرات انرژی ریزنوارها برای چاه کوانتومی چندگانه GaN/AlN با عرض چاه ثابت یک نانومتر (اما عرض کل غیر ثابت) نیز بررسی شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود برای یک ساختار چاه کوانتومی چندگانه با عرض کل غیر ثابت (شکل 1-5 الف) با افزایش تعداد چاه زیرنوارها تشکیل شده و عرض آنها افزایش می یابد و سپس ثابت می شود. در این فرایند عرض ریزنوارها و ریزگافها با افزایش تعداد چاههای کوانتومی افت و خیز ندارد. همانطور که در شکل 1-5 ب و ج و د دیده می شود رفتار

ریزنوارها در ساختار چاه کوانتومی با عرض کلی ثابت کاملاً متفاوت است. در اینجا تعداد چاه ها تا جایی افزایش داده شده اند که عرض تقریبی هر چاه از $1/2$ نانومتر کمتر نشود. بررسی رفتار انرژی زیرترازها با افزایش تعداد چاه نشان می دهد که به دلیل کاهش عرض چاه ها ریزنوارها شروع به تشکیل شدن کرده و در نتیجه عرض هر نوار انرژی افزایش می یابد. این روند به خوبی در چاههای کوانتومی با عرض کل ثابت دیده می شود. بدلیل عریض شدن هر نوار با کاهش عرض چاه، تغییرات انرژی ریزگافها نیز غیر یکنواخت است. برای مشاهده بهتر رفتار ریزنوارها و ریزگافها، نمودار تغییرات آنها بر حسب تعداد چاه برای نمونه با عرض کلی ۶۰ نانومتر در شکل ۵-۲ نشان داده شده است.



شکل ۴-۱ نمودار تغییرات انرژی ریزنوارها بر حسب تعداد چاه برای سیستم چاه کوانتومی چند گانه AlN/GaN
 الف: چاه کوانتومی چندگانه با عرض ثابت یک نانومتر (عرض کل غیر ثابت) ب: چاه کوانتومی چندگانه با عرض کل ثابت ۴۰ نانومتر ج: چاه کوانتومی چندگانه با عرض کل ثابت ۶۰ نانومتر د: چاه کوانتومی چندگانه با عرض کل ثابت ۱۰۰ نانومتر

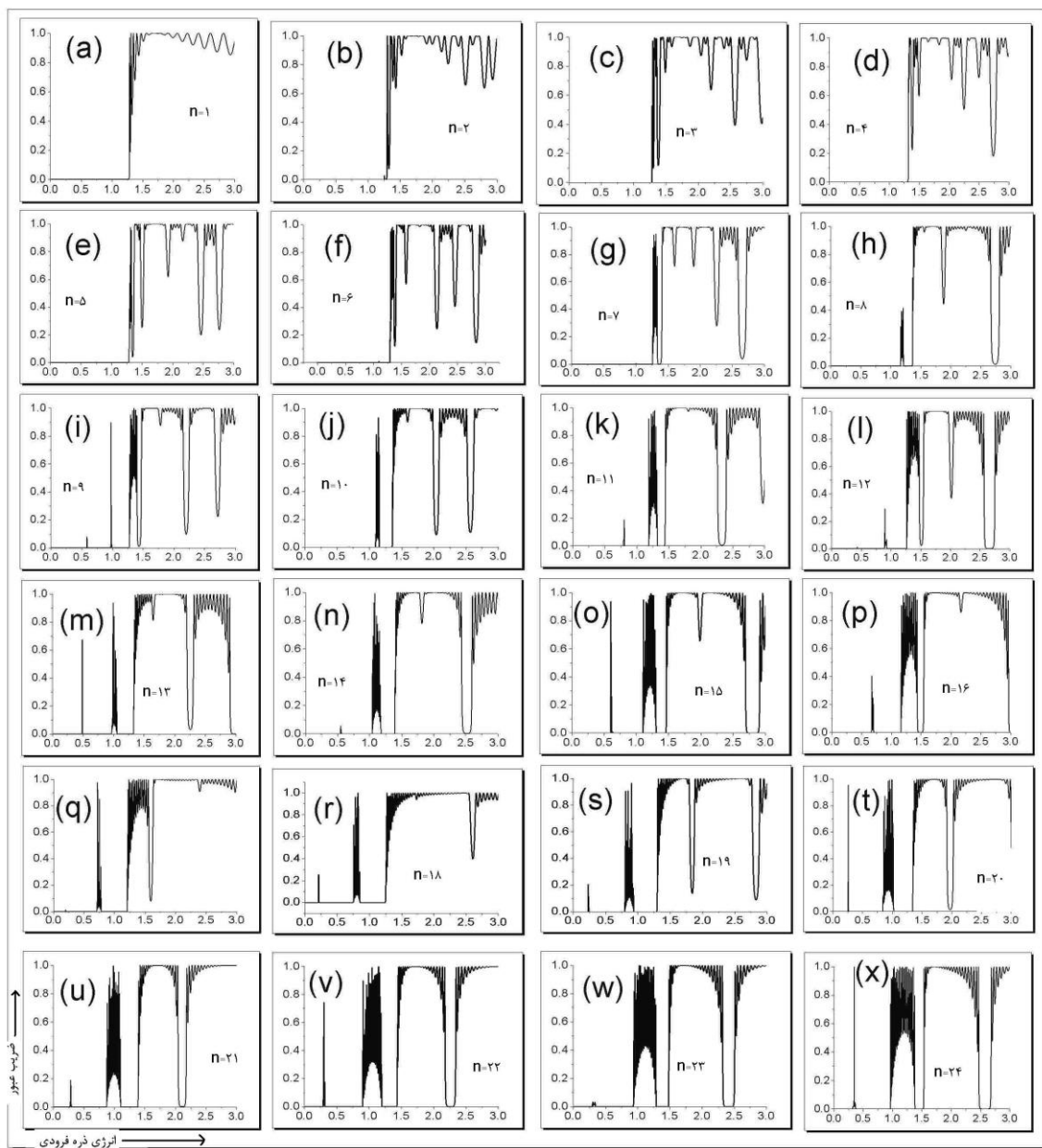
همانطور که این شکل نشان می دهد درحالیکه برای دومین ریزگاف با افزایش تعداد چاه (تا حدود ۷) ابتدا انرژی افزایش یافته و سپس کاهش می یابد، برای اولین ریزگاف با افزایش تعداد چاه (تا حدود ۱۴ چاه) انرژی افزایش یافته و سپس ثابت باقی می ماند. همچنین این بررسی نشان می دهد که هر سه ریزنوار (برای سیستم های با ضخامت متفاوت) دارای رفتار یکنوای افزایشی با افزایش تعداد چاه می باشند. روند این تغییرات برای ریز نوارهای دوم و سوم با افزایش تعداد چاهها شدیدتر است. نمای کلی تشکیل ریزنوارها در سیستم با تعداد چاه مختلف نشان می دهد که با افزایش عرض کل، به دلیل افزایش تعداد چاهها پهنای ریزنوارها افزایش می یابد.



شکل ۴-۲ عرض سه ریزنوار اول و دو گاف ریزنوار برای ابرشبکه با طول کلی ثابت ۶۰ نانومتر

بنابراین با تغییر عرض کلی ساختار یا تعداد چاههای کوانتومی در این عرض مشخص می توان عرض ریزنوارها و ریزگافها را مهندسی نمود.

در ادامه این بررسی نحوه تشکیل ریزنوارها ضرایب عبور الکترون بر حسب انرژی در چاههای کوانتومی چندگانه مورد نظر را با استفاده از روش ماتریس انتقال محاسبه کرده ایم [۱۶۶]. نتیجه این محاسبات در شکل های (۳-۵) نشان داده شده است.

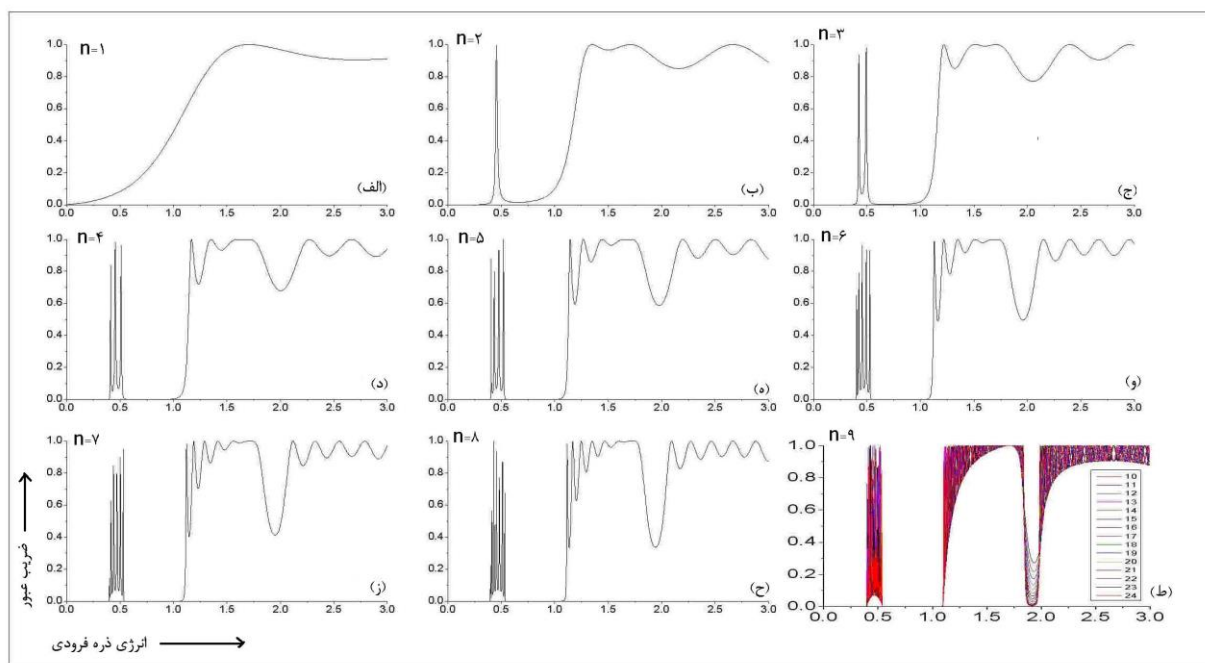


شکل ۳-۴ نمودار ضرایب عبور برحسب انرژی ذره فرودی (eV) برای ساختار چاه کوانتومی چندگانه GaN/AlN با عرض کل ۶۰ نانومتر.

همانطور که در این شکلها دیده می شود برای یک سیستم رانشی^۱ تا انرژی های زیر جابجایی نواری (۱۲۸۰ میلی الکترون ولت) عبوری مشاهده نمی شود. این منطقه را منطقه ممنوعه کلاسیکی می نامند. در همه سیستم ها دیده می شود که تشکیل ریزنوار تقریباً از ساختارهایی با تعداد ۷ چاه شروع می شود. این رفتار با رفتار مشاهده شده در شکل ۵-۱ ج در توافق است. کوچکی عرض ریز

¹ Repulsive

نوار در شکل (g-۳-۵) قابل رویت می باشد. سیستم های با تعداد چاه کمتر از ۷ شبیه چاههای کوانتومی چندگانه رفتار می کنند که ریزنوار در آنها تشکیل نمی شود. با افزایش تعداد چاه و ثابت نگه داشتن عرض کل سیستم تعدادی ریزنوار در منطقه ممنوعه تشکیل می شود.



شکل ۴-۴ نمودار ضرایب عبور یک ابرشبهه با عرض چاه ثابت یک نانومتر (عرض کل متغیر) AlN/GaN بر حسب انرژی ذره فرودی.

به منظور مقایسه، رفتار ضرایب عبور یک ابرشبهه با عرض چاه ثابت یک نانومتر (عرض کل متغیر) AlN/GaN بر حسب انرژی ذره فرودی بررسی شده است. نتایج این بررسی در شکل های ۴-۵ تا الف تا ۴-۵ ط نشان داده شده اند. همانطور که در این شکل دیده می شود با افزایش تعداد چاههای کوانتومی یک ریزنوار در منطقه ممنوعه تشکیل می شود که با افزایش بیشتر تعداد چاهها پهنای آن نیز به تدریج افزایش می یابد. در حالیکه موقعیت تشکیل ریزنوارها روی محور انرژی ثابت است.

این در حالیست که در ساختار مطالعه شده با عرض کل ثابت به نظر می رسد که موقعیت انرژی ریزنوارها جابجا می شوند. بررسی انجام شده نشان می دهد که موقعیت انرژی ریزنوارها با افزایش تعداد چاه در منطقه ممنوعه توزیع می شود. به عنوان مثال با افزایش تعداد چاهها هنگامی که یک

ابرشبکه شروع به تشکیل می کند (سیستم ۷ چاهی) ریزنوارهای جدید در همسایگی انرژی جابجایی نواری (۱۲۸۰ میلی الکترون ولت) قابل رویت می باشد. با افزایش تعداد چاه ها (مثلا ۱۳ و ۱۴ و یا ۱۵) مشاهده می شود که موقعیت انرژی ریزنوارها به سمت انرژیهای کمتر جابجا می شود. در ضمن هنگامی که یک چاه به ساختار اضافه می شود ریزنوارها در ساختار قبلی به سمت انرژیهای بیشتر در ساختار جدید جابجا شده، پهنتر می شوند و سرانجام با ریزنوار دیگری در سمت راست خود ترکیب می گردند. در همین زمان مشاهده می شود که تعدادی ریزنوار جدید در انرژیهای کمتر ظاهر می شوند. این رفتار با نتایج بدست آمده در قسمت قبل (شکل ۵-۱) در توافق است. همچنین، همانطور که در شکل های (۵-۳) دیده می شود ریزنوار دوم (سمت راست) سریعتر از ریزنوار اول (سمت چپ) عریض می شود و این همان چیزی است که در شکل (۵-۱) نیز مشاهده می گردد. لازم به ذکر است که چنین رفتاری در ابرشبکه های معمولی (عرض کل متغیر و عرض چاه و سد ثابت) دیده نمی شود.

نتیجه گیری

با کمک روش های تفاضل محدود و ماتریس انتقال انرژی ریزنوارها و همچنین ضرایب عبور در ساختار چاه کوانتومی چندگانه AlN/GaN با ضخامتهای کلی ۴۰، ۶۰ و ۱۰۰ نانومتر بررسی شدند. برای یک ساختار چاه کوانتومی چندگانه با عرض کل غیر ثابت با افزایش تعداد چاه زیرنوارها تشکیل شد، عرض آنها افزایش یافت و سپس ثابت شد. در این فرایند عرض ریزنوارها و ریزگافها با افزایش تعداد چاههای کوانتومی افت و خیز نداشت. برای یک ساختار چاه کوانتومی چندگانه با عرض کل ثابت به دلیل کاهش عرض چاه ها ریزنوارها شروع به تشکیل شدن کردند و در نتیجه عرض هر نوار انرژی افزایش یافت. بدلیل عریض شدن هر نوار با کاهش عرض چاه، تغییرات انرژی ریزگافها نیز غیر یکنواخت بود. درحالیکه برای دومین ریزگاف با افزایش تعداد چاه (تا حدود ۷) ابتدا انرژی افزایش یافته و سپس کاهش می یافت، برای اولین ریزگاف با افزایش تعداد چاه (تا حدود

۱۴ چاه) انرژی افزایش یافته و سپس ثابت باقی می ماند. نمای کلی تشکیل ریزنوارها در سیستم با تعداد چاه مختلف نشان داد که با افزایش عرض کل، به دلیل افزایش تعداد چاهها پهنای ریزنوارها افزایش می یابد. بنابراین با تغییر عرض کلی ساختار یا تعداد چاههای کوانتومی در این عرض مشخص می توان عرض ریزنوارها و ریزگافها را مهندسی نمود. برای تایید یافته ها نحوه تشکیل ریزنوارها با کمک محاسبه ضرایب عبور الکترون بر حسب انرژی در چاههای کوانتومی چندگانه مورد نظر با استفاده از روش ماتریس انتقال مورد بررسی قرار گرفت. در ساختار با عرض کل ثابت به نظر می رسید که موقعیت انرژی ریزنوارها جابجا می شوند. بررسی انجام شده نشان داد که موقعیت انرژی ریزنوارها با افزایش تعداد چاه ها در منطقه ممنوعه توزیع می شود. همچنین هنگامی که یک چاه به ساختار اضافه می شد ریزنوارها در ساختار قبلی به سمت انرژیهای بیشتر در ساختار جدید جابجا شده، پهنتر می شدند و سرانجام با ریزنوار دیگری در سمت راست خود ترکیب می گردیدند. در همین زمان مشاهده می شد که تعدادی ریزنوار جدید در انرژیهای کمتر ظاهر می شوند. این رفتار با نتایج بدست شده بروش تفاضل محدود در توافق بود.

۵-۲ فیلتر های اسپینی بر پایه چاههای کوانتومی چند گانه

GaAs/GaAl_{0.7}As_{0.3} با طول موثر کلی ثابت

۵-۲-۱ مقدمه

در دهه های اخیر توجه زیادی به طبیعت برهمکنش بین اسپین حاملهای بار و محیط اطراف آنها در نانوساختارهای نیمرسانا جلب شده است. منظور از برهمکنش اسپین-مدار، برهمکنش میان μ_s و میدان مغناطیسی درونی اتم می باشد. چون میدان مغناطیسی درونی از اندازه حرکت زاویه ای مداری الکترون ناشی می شود یعنی به اندازه حرکت زاویه ای مداری الکترون مربوط است به همین دلیل، برهمکنش فوق را برهمکنش اسپین-مدار گویند. مطالعات نظری اخیر امکان قطبش اسپین الکترونها از طریق تونل زنی تشدید^۱ را نشان داده است [۱۶۸]. پدیده ترابرد اسپینی می تواند در اثر برهمکنش اسپین مدار راشبا^۲ و درسلهاوس^۳ ایجاد شود [۱۶۸-۱۶۹]. برهمکنشهای اسپین-مدار راشبا و درسلهاوس به خاطر عدم تقارن وارونی ساختاری^۴ و عدم تقارن وارونی حجمی^۵ رخ می دهد [۱۷۰-۱۷۱]. اثر فیلتر اسپینی ممکن است در مواد مغناطیسی [۱۷۲] و غیر مغناطیسی [۱۷۳] ظاهر شود. یک راه مستقیم برای بررسی پدیده فیلتر اسپینی محاسبه ضرایب عبور و قطبش اسپینی است [۱۷۴-۱۷۵]. در این کار با استفاده از روش مرز عبوری کوانتومی^۶ [۱۷۶] (مسئله مطرح شده در بخش ۳-۱ به ازای شرایط مرزی باز) ضرایب عبور و همچنین قطبش اسپینی برای چاه کوانتومی چندگانه GaAl_{0.7}As_{0.3}/GaAs با عرض کل ثابت ۶۰ نانومتر محاسبه و بررسی شده اند.

¹ Resonant tunnelling

² Rashba spin-orbit interaction (RSOI)

³ Dresselhaus spin-orbit coupling (DSOC)

⁴ Structural inversion asymmetry

⁵ Bulk inversion asymmetry

⁶ Quantum transmitting boundary method

۵-۲-۲ رهیافت

تراپرد الکترونها با بردار موج $k = (k_{||}, k_z)$ در ساختار چاه کوانتومی $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$ که در راستای [001] رشد داده شده باشد را می توان با کمک رهیافت تابع پوش و تقریب جرم موثر بررسی نمود. بردارهای موج در صفحه فصل مشترک و مولفه برعمود بر آن به ترتیب با k_z و $k_{||}$ نشان داده می شوند. هامیلتونی مورد استفاده در این بررسی را می توان بصورت زیر نوشت:

$$\left(-\frac{P^2}{2m^*} + V + H_{SO} \right) \psi = E \psi \quad (3-5)$$

جمله برهمکنش اسپین مدار نیز با معادله زیر مشخص می شود:

$$H_{SO} = H_{Dresselhaus} = \gamma \left[\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2) \right] \quad (4-5)$$

که در آن σ_i و k_i به ترتیب ماتریس پائولی و بردار موج الکترون هستند. بعلاوه $\gamma (= 76 \text{ eV } \text{\AA}^{-3})$ شدت برهمکنش اسپین مدار در سلهاوس است که با مدل کین^۱ [۱۷۷] محاسبه می شود. ضرایب عبور ($t_{\pm}$) با کمک روش مرز عبوری کوانتومی محاسبه شده اند. قطبش اسپینی (P) هم که نماینده اختلاف نسبی عبور اسپینهای بالا و پایین است نیز از رابطه زیر بدست می آید:

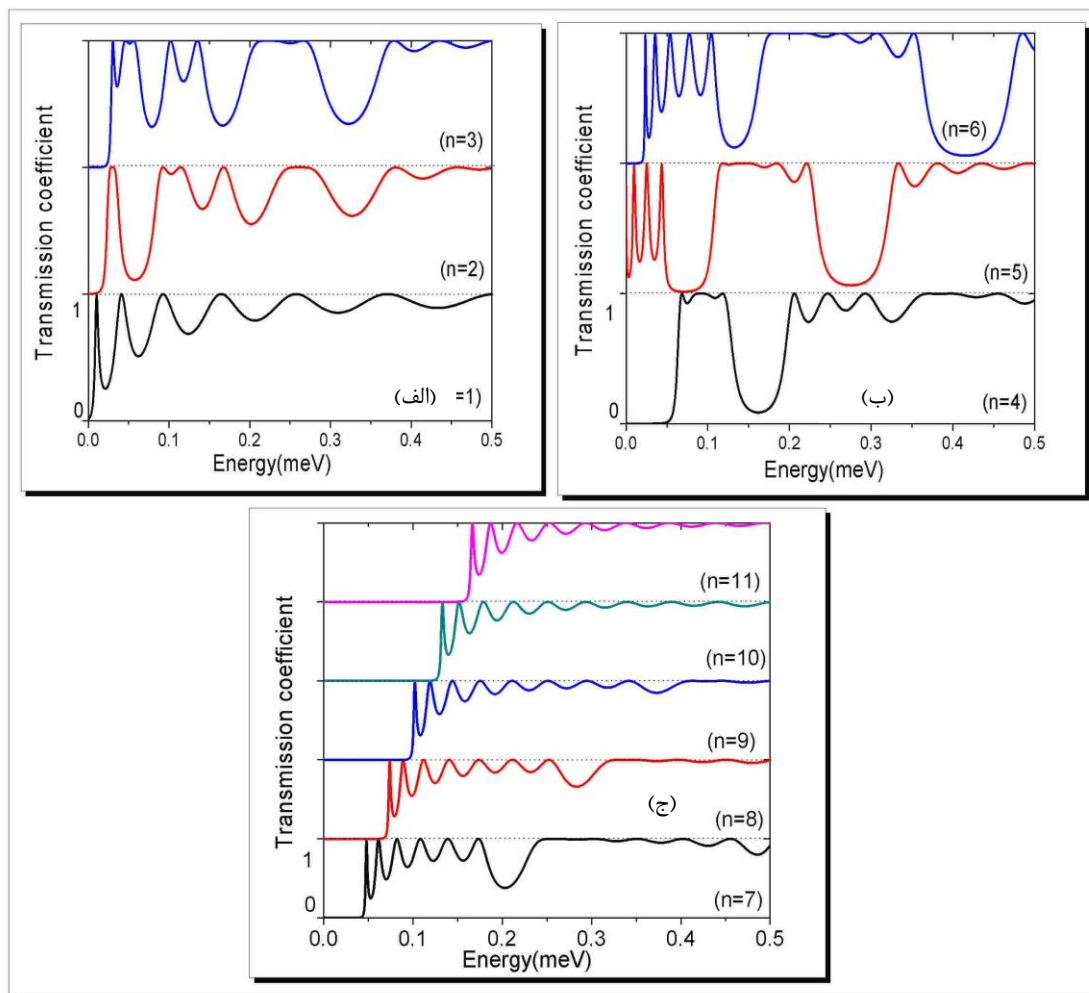
$$P = \frac{|t_+|^2 - |t_-|^2}{|t_+|^2 + |t_-|^2} \quad (5-5)$$

در این محاسبات مقادیر جرم موثر الکترون در $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}$ و GaAs به ترتیب برابر $m^* = 0.067m_e$ و $m^* = 0.0914 m_e$ در نظر گرفته شده اند [۱۷۸]. همچنین مقادیر $k_{||}$ و پتانسیل محصور سازی به ترتیب برابر $0.04 \text{ \AA}^{-1}$ و 0.2 eV فرض شده اند. عرض کل ساختار نیز ثابت و برابر 60 nm در نظر گرفته شده است.

۵-۲-۳ نتایج و بحث:

¹ Kane model

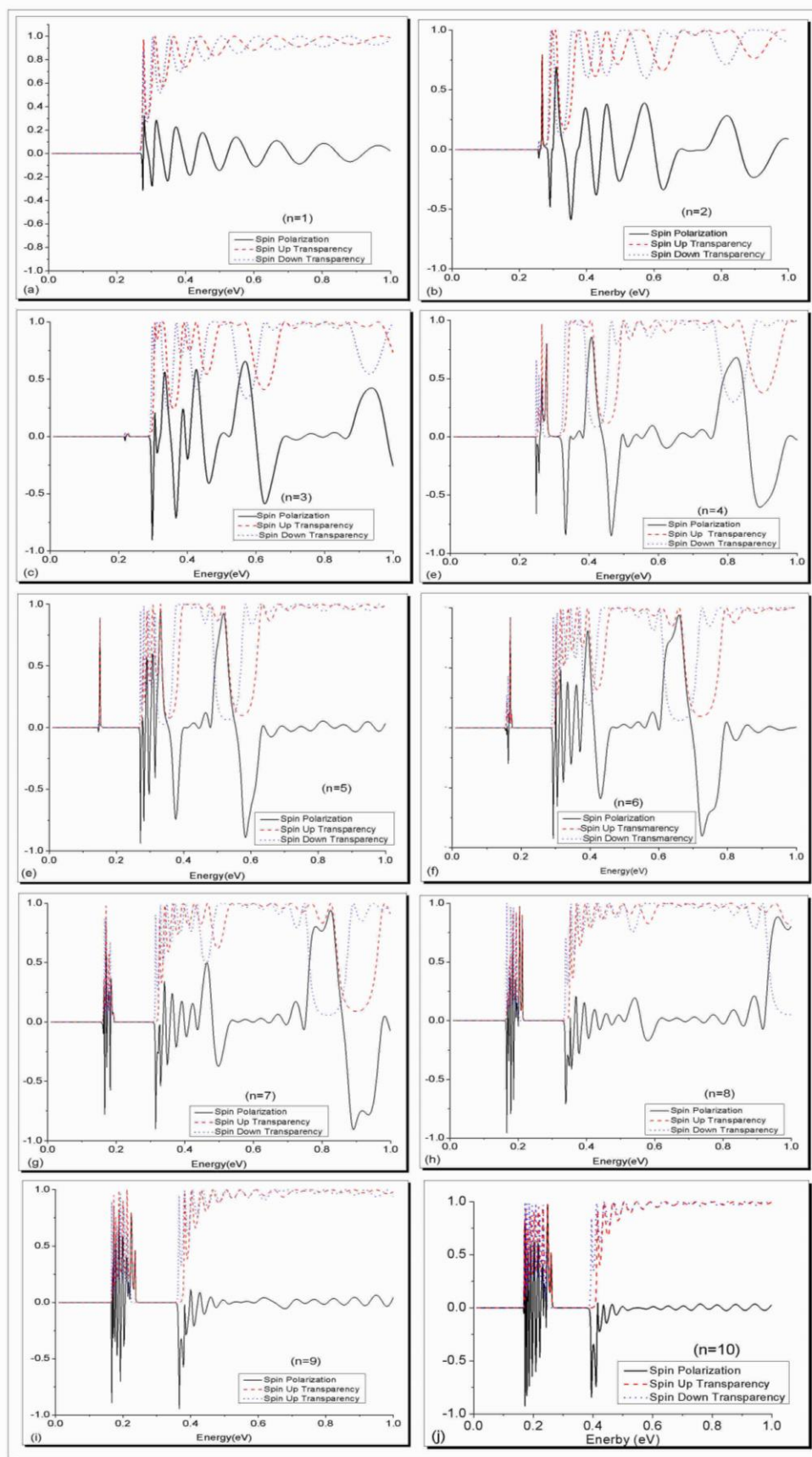
به منظور مطالعه طبیعت ترابرد الکترونها در این ساختار ابتدا از اثر برهمکنش اسپین مدار (جمله H_{SO} در رابطه (۵-۳)) صرف نظر کرده ایم. در شکل (۵-۵) ضرایب عبور محاسبه شده برای برای چاه کوانتومی چندگانه مفروض ($1 < n < 11$) نشان داده شده است. قله ها در نمودار عبور در اثر تشدید انرژی ایجاد می شوند [۱۵۳]. هنگامی که انرژی ذره با یکی از انرژی های سیستم (حالات شبه مقید) یکی شود به دلیل تداخل سازنده موج رونده و موج انعکاسی از سد بعدی ناگهان عبور بیشینه می شود با تغییر در انرژی شرط تداخل سازنده از بین می رود و در نتیجه عبور کاهش می یابد.



شکل ۴-۵ ضرایب عبور بر حسب انرژی در چاههای کوانتومی چند گانه $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$ با عرض کل ثابت ۶۰ (نانومتر).

همانطور که در این شکل ها دیده می شود برای بعضی از مقادیر انرژی، ضرایب عبور برابر یک (عبور صد درصد) می شود. در چاه کوانتومی یگانه با افزایش انرژی، عبور کلی افزایش یافته و رفتار نوسانی طیف عبور کاهش می یابد. بررسی رفتار عبور نشان می دهد که با افزایش تعداد چاه (در حالیکه عرض کلی سیستم ثابت نگه داشته شده است) تعدادی دره عمیق در نمودار عبور ظاهر می شود. با افزایش تعداد چاهها موقعیت دره های عبور به سمت انرژیهای بیشتر در راستای محور انرژی جابجا می شوند. با افزایش تعداد چاه این روند ادامه می یابد. در این فرایند لبه عبور نیز به سمت انرژی های بیشتر جابجا می شود.

در ادامه جفت شدگی اسپین مدار را نیز به هامیلتونی معادله ۵-۳ اضافه نموده و ضرایب عبور اسپین بالا و پایین و همچنین قطبش اسپینی را محاسبه می کنیم. نتیجه این محاسبات در شکل ۵-۶ نشان داده شده است. بدیهی است زمانی که یکی از ضرایب عبور و قطبش اسپینی همزمان بیشینه شوند عمل فیلترینگ صورت پذیرفته است. این امر منجر به ایجاد یک جریان تونلی با اسپینهای قطبیده می شود. بررسی نتایج بدست آمده نشان می دهد که با افزایش تعداد چاهها، در بعضی از گستره های انرژی، ضرایب عبور به بیشترین مقدار خود یعنی ۱ می رسند. همچنین در بعضی از گستره های انرژی با این پدیده روبرو می شویم که بیشینه عبور برای اسپینهای بالا و پایین در یک گستره انرژی رخ نمی دهند که نتیجه آن قطبش اسپینی در آن گستره انرژی است. مقایسه قطبش اسپینی سیستم های با تعداد چاههای متفاوت (در گستره انرژی مورد بررسی ۰ تا ۱ الکترون ولت) نشان می دهد که قطبش اسپینی برای نمونه های با تعداد چاه ۵ و ۶ و ۷ از همه بیشتر است. در سیستم ۶ چاه این گستره تقریباً ۱۵۰ میلی الکترون ولت و در سیستم ۷ چاه این گستره تقریباً ۱۸۰ میلی الکترون ولت خواهد بود که به ترتیب در گستره های انرژی [۰/۷۷-۰/۶۲] و [۰/۷۷-۰/۹۵] الکترون ولت رخ می دهند. مقایسه این نتایج نشان می دهد که این گستره انرژی با افزایش تعداد چاه به سمت انرژی های بزرگتر جابجا می شود.



شکل ۴-۶ ضرایب عبور مربوط به ذرات با اسپین بالا و پایین و همچنین قطبش اسپینی در چاههای کوانتومی $\text{GaAs}/\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}$ با طول کلی ثابت ۶۰ نانومتر

بنابراین با تغییر تعداد چاه می توان قطبش اسپینی، گستره ای از انرژی که در آن قطبش اسپینی رخ می دهد و همچنین موقعیت این گستره را مهندسی نمود.

علت بروز نوسانات شدید در بعضی از گستره های انرژی مثلا در حدود 0.2 الکترون ولت در سیستم ۸ چاه، به نظر می رسد بدلیل تشکیل ریز نوار در این سیستم می باشد. که در بخش قبل به آن پرداخته شد. در این گستره از انرژی قطبش اسپینی با تغییرات اندک انرژی به سرعت صفر می شود و با اندک تغییر دیگر، دوباره به یک مقدار محدود قابل ملاحظه ای بر می گردد.

نتیجه گیری

با کمک روش مرز عبوری کوانتومی ضرایب عبور ($t_{\pm}$) و همچنین قطبش اسپینی (P) برای سیستم چاه کوانتومی چندگانه $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$ محاسبه شدند. در ابتدا اثر برهمکنش اسپین مدار در نظر گرفته نشد و نشان داده شد که با افزایش تعداد چاه (و در عرض کلی ثابت سیستم) لبه عبور به سمت انرژی های بیشتر جابجا می شود. برای این که گستره ای از انرژی بیابیم که در آن یکی از ضرایب عبور بالا و پایین و همچنین قطبش اسپینی همزمان ماکزیمم شود باید جفت شدگی اسپین مدار در سلهاوس روشن شود. با افزایش تعداد چاهها، در بعضی گستره های انرژی، ضرایب عبور به بیشترین مقدار خود یعنی (یک) رسیدند. از آنجایی که بعضی اوقات این ماکزیمم ها برای اسپینهای بالا و پایین در یک گستره انرژی رخ نمی دهند بنابراین قطبش اسپینی در آن گستره انرژی حاصل شد. مقایسه قطبش اسپینی سیستم های با تعداد چاههای متفاوت (در گستره انرژی مورد بررسی ۰ تا ۱ الکترون ولت) نشان داد که قطبش اسپینی برای نمونه های با تعداد چاه ۵ و ۶ و ۷ از همه بیشتر است. در سیستم ۶ چاه این گستره تقریبا ۱۵۰ میلی الکترون ولت و در سیستم ۷ چاه این گستره تقریبا ۱۸۰ میلی الکترون ولت بود که به ترتیب در گستره های انرژی $[0.62-0.77]$ و $[0.77-0.95]$ الکترون ولت رخ می داد. بنابراین با تغییر تعداد چاه می توان قطبش اسپینی، گستره ای از انرژی که در آن قطبش اسپینی رخ می دهد و همچنین موقعیت این

گستره را مهندسی نمود. علت بروز نوسانات شدید در بعضی از گستره های انرژی مثلا در حدود ۰/۲ الکترون ولت در سیستم ۸ چاهه نیز به نظر می رسد بدلیل تشکیل ریز نوار در این سیستم می باشد. . در این بخش ۳۰۰ خط برنامه C++ روی روش تفاضل محدود و همچنین ۷۰۰ خط برنامه C++ روی روش ماتریس انتقال و همچنین ۵۰۰ خط برنامه *MATLAB* روی روش مرز عبوری کوانتومی نوشته شد.

فصل ۶: الگوریتم های: نظریه تابعی چگالی اسپینی وابسته به
دما و روش خودسازگار K.P شش نواره برای بررسی : الف:
اثرات دما بر قطبش اسپینی گاز الکترون دو بعدی، ب: مطالعه
اثرات آلایش عنصر مغناطیسی منگنز و دما بر گاز حفره دو
بعدی محصور در چاههای کوانتومی چند گانه GaN/AlN ,



The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact solution of these laws leads to equations much too complicated to be soluble.

Paul Dirac 1929

۶-۱ بررسی اثر دما قطبش اسپینی یک گاز الکترون دو بعدی محصور در چاه

کوانتومی چندگانه $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ به روش الگوریتم تابعی چگالی

اسپینی وابسته به دما

۶-۱-۱ مقدمه

در طی سالهای اخیر پژوهش در حوزه ترابرد وابسته به اسپین در سیستم های نانو ساختار از موضوعات مورد علاقه پژوهشگران بوده است [۵۶]. مطالعات نظری در خصوص قطبش اسپینی در گازهای الکترونی رقیق [۹۰] و همچنین شواهد تجربی برای این پدیده [۱۶۰-۱۶۱] ارائه شده اند. همچنین امکان فرومغناطیس شدن گاز الکترونی دو بعدی در آزمایش های ترابرد در چاه کوانتومی یگانه GaAs گزارش شده است [۱۶۰] و امکان کنترل قطبش اسپینی گاز الکترون دو بعدی در چاه کوانتومی CdTe توسط گروه فیلیپس و همکاران [۱۶۱] گزارش شده است.

مطالعه سیستم گاز الکترون دو بعدی با استفاده از نظریه تابعی چگالی اسپینی امکان پذیر می باشد. پایه این روش نظریه توماس-فرمی می باشد که برپایه آن، برای بررسی کوانتومی دستگاه بس الکترونی، از چگالی الکترونی به جای تابع موج این دستگاه استفاده می شود. در نظریه توماس فرمی برهم کنش تبادلی-همبستگی لحاظ نمی شود. در روش تابعی چگالی ابتدا معادله بس ذره ای به چند معادله تک ذره ای شکسته می شود و با حل آنها می توان ساختار الکترونی سیستم را تعیین کرد. بنابراین در روش تابعی چگالی ابتدا با کمک قضیه اول هوهنبرگ-کوهن^۱ ثابت می شود که ویژگیهای حالت پایه یک سیستم بس الکترونی به طور یکتا با یک چگالی الکترونی وابسته به سه مختصه فضایی تعیین می شوند. سپس با کمک قضیه دوم هوهنبرگ-کوهن یک تابعی انرژی

¹ Hohenberg-Kohn

تعریف می شود و ثابت می شود که چگالی الکترونی حالت پایه این تابعی را کمینه می کند. در نهایت با کمک رهیافت کوهن-شم سیستم برهمکنشی روی سیستم غیربرهمکنشی تصویر شده و این سیستم جدید حل می شود. در واقع، در سیستم غیر برهمکنشی، الکترونهای غیرهمکنش در یک پتانسیل موثر حرکت می کنند. این پتانسیل موثر شامل پتانسیل خارجی و برهمکنش کولنی بین الکترونها (مثلا برهمکنش تبادلی همبستگی) می شود. مشکل روش تابعی چگالی کوهن-شم وارد کردن اثر پتانسیل تبادلی همبستگی است که شکل بسته (یا دقیق)^۱ تحلیلی ندارد. ولی با کمک رهیافتهای عددی یک تابعی پارامتری شده برای آن ارائه می دهند. در این کار از رهیافت ارائه شده در مرجع [۱۷۹] استفاده شده است. امکان وارد کردن دما در محاسبات برپایه نظریه تابعی چگالی اسپینی دشواریهای زیادی را به همراه دارد. در این مطالعه با استفاده از یک الگوریتم تابعی چگالی اسپینی وابسته به دما^۲ قطبش اسپینی گاز الکترون دو بعدی محصور در یک سیستم چاه کوانتومی چندگانه $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ با عرض کلی ثابت و همچنین اثر دما بر تراز فرمی و زیر تراز های این سیستم بررسی شده است. در این محاسبات از حل خود سازگار معادله شرودینگر و معادله پواسون کمک گرفته شده است. برای ایجاد ناهمسانگردی به منظور ایجاد قطبش اسپینی از یک میدان مغناطیسی بسیار ضعیف در راستای رشد چاه کوانتومی استفاده شده است.

۶-۱-۲ رهیافت محاسبات

هامیلتونی حاکم در این مساله را می توان بصورت زیر در نظر گرفت:

$$\left(-\frac{p^2}{2m^*} + V\right)\phi = E\phi \quad (۱-۶)$$

که در آن m^* جرم موثر الکترون و V پتانسیل محصور سازی است که شامل پتانسیل برهمکنش تبادلی-همبستگی (V_{xc}^σ)، پتانسیل هارتری ($V_{s.c.}$) و جمله زیمان ($g\mu_B B\sigma$) می باشد. در جمله زیمان σ اسپین الکترونها ($\pm 1/2$)، μ_B مگنتون بوهر، $g=2$ و B میدان مغناطیسی هستند. تقریب

¹ Closed form

² Temperature dependent spin density functional theory

چگالی اسپینی موضعی^۱ (LSDA) بر پایه حل خود سازگار معادلات کوهن-شم استوار است. تفاوت عمده تقریبهای چگالی الکترون موضعی^۲ (LDA) و تقریب LSDA در این است که پتانسیل برهمکنش تبادلی-همبستگی همزمان به چگالی ذرات و قطبش اسپینی موضعی وابسته است. بنابراین بایستی بطور همزمان دو معادله کوهن-شم جفت شده که شامل پتانسیلهای موثر وابسته به اسپین می باشند حل شود. تقریب LSDA اولین بار توسط هدین و همکاران [۱۸۰] و همچنین ژانت و همکاران [۱۸۱] فرمول بندی شد. از این تقریب می توان برای مطالعه سیستم های فرومغناطیسی در حضور و یا عدم حضور میدان مغناطیسی استفاده نمود [۱۸۲].

گاز دو بعدی وابسته به اسپین بوسیله چگالی $\rho = \rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}$ شناخته می شود که در آن $\rho_{\uparrow}$ و $\rho_{\downarrow}$ به ترتیب چگالی حاملهای با اسپین بالا و پایین می باشند. بنابراین جمله پتانسیل هارتری بصورت زیر نوشته می شود:

$$\nabla^2 V_{s.c.} = \frac{e^2}{\epsilon_r \epsilon_0} [N_{im} - (p_{\uparrow} + p_{\downarrow})] \quad (۲-۶)$$

که در این رابطه $p_{\uparrow}$ و $p_{\downarrow}$ به ترتیب چگالی های اسپین بالا و پایین ذرات و N_{im} تراکم ناخالصی های دهنده می باشند. همچنین برای در نظر گرفتن جمله پتانسیل برهمکنش تبادلی-همبستگی از رهیافت ارائه شده در مرجع [۱۷۹] استفاده کرده ایم. بخش همبستگی این انرژی از برهمکنش میان لایه های بسته ی اتم ها ناشی می شود بطوریکه با افزایش تعداد لایه های بسته، مقدار انرژی همبستگی کاهش می یابد. در این کار معادلات (۱-۶) و (۲-۶) با روش برش زنی [۱۶۴] و بصورت خود سازگار حل شده اند. چگالی های حاملهای اسپین بالا و پایین با کمک رابطه زیر بدست آمده اند [۱۵۴]:

$$p_n^{\sigma} = \frac{m^* k_B T}{2\pi \hbar^2} |\phi_n^{\sigma}|^2 \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\epsilon_n^{\sigma} - \mu}{k_B T} \right) \right] \quad (۳-۶)$$

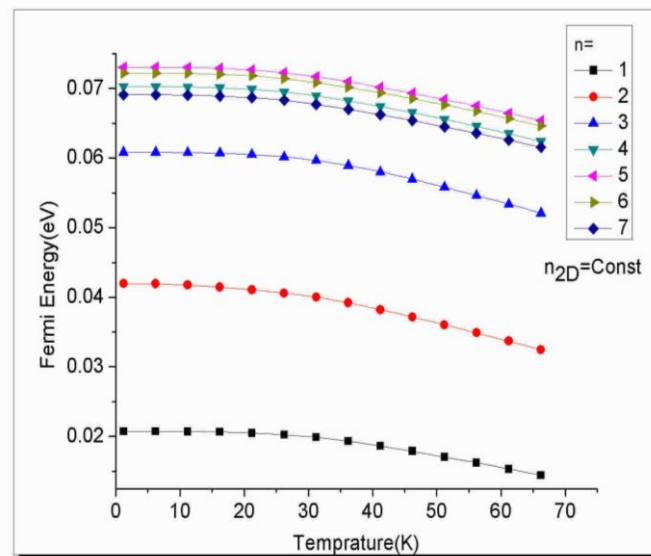
^۱ Local-spin-density approximation (LSDA)

^۲ Local-density approximation (LDA)

که در این رابطه پارامترهای σ , $\hbar$, T , k_B , m^* , μ به ترتیب معرف اسپین بالا یا پایین، دمای مطلق، ثابت بولتزمن، جرم موثر، ثابت پلانک و پتانسیل شیمیایی هستند.

۳-۱-۶ نتایج و بحث

برای بررسی چگالی حاملهای اسپین بالا و پایین و سپس قطبش اسپینی نیاز به دانستن انرژی فرمی است که می تواند از طریق رابطه ۳-۶ به دست آید. این بررسی در این کار انجام شده است. نتایج محاسبات مربوط به اثر دما بر تراز فرمی در شکلهای (۱-۶) نشان داده شده است.

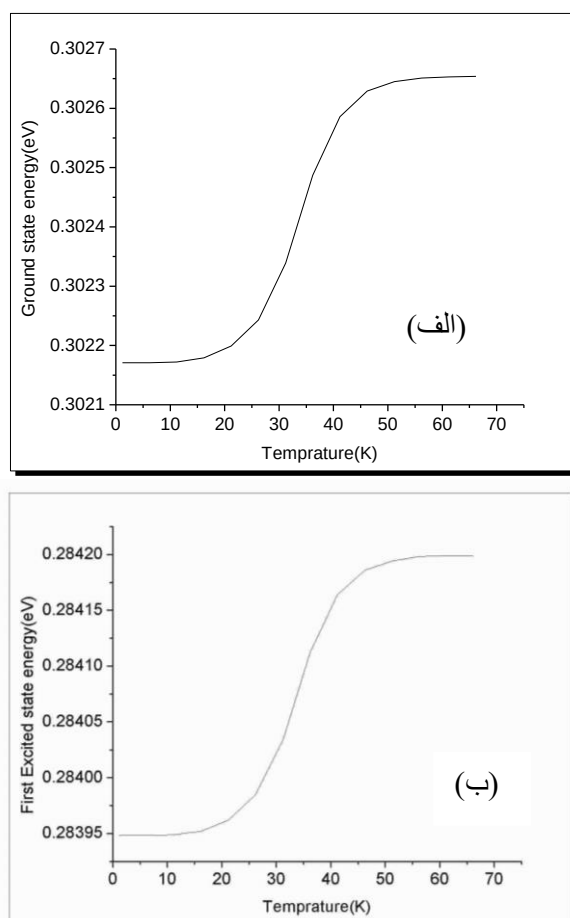


شکل ۱-۶ نمودار تغییرات انرژی فرمی بر حسب دما به ازای تعداد مختلف چاه.

همانطور که در این شکل دیده می شود در همه نمونه های مطالعه شده افزایش دما می تواند منجر به کاهش انرژی فرمی شود. در گستره دمایی بررسی شده میزان کاهش انرژی فرمی در حدود ۱۰-۱۵ میلی الکترون ولت برای هر سیستم می باشد. همچنین انرژی فرمی برای نمونه های شامل ۴ تا ۷ چاه بسیار به یکدیگر نزدیک هستند. این نشان می دهد در صورتی که چگالی گاز الکترون دو بعدی (n_{2D}) ثابت باشد افزایش تعداد چاه از یک میزان به بعد (در این کار ۴ چاه) تاثیر قابل توجهی در انرژی فرمی نخواهد داشت. در تمام محاسبات انجام شده در این بخش مقدار n_{2D} برابر 10^{15} در نظر گرفته شده است مگر آنکه عدد دیگری ذکر شده باشد.

مقایسه تغییرات انرژی فرمی با دما در نمونه های مطالعه شده نشان می دهد که فاصله بین ترازهای انرژی سیستم m چاهه و $m+1$ چاهه با افزایش m کاهش می یابد.

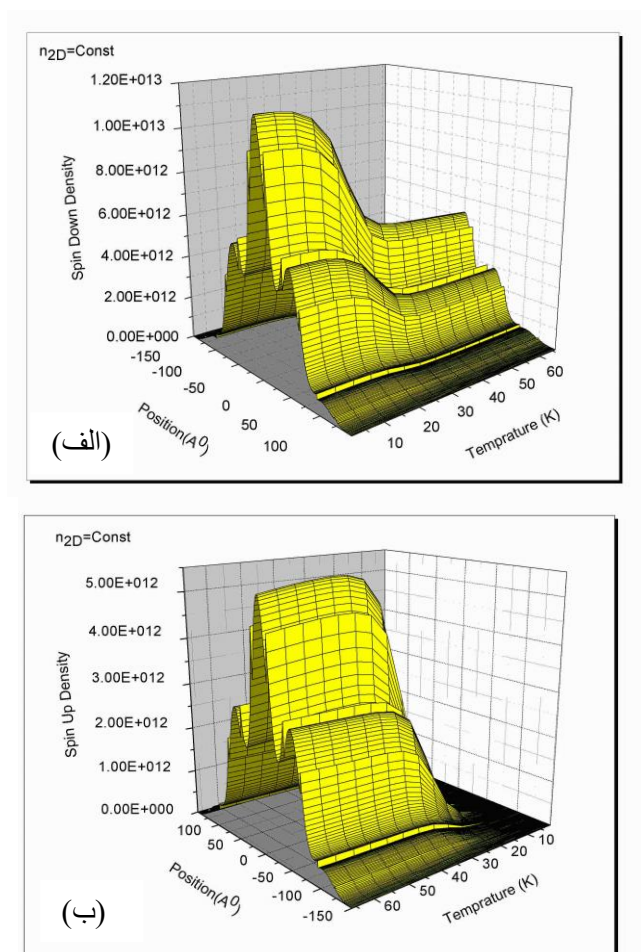
در ادامه این کار اثر دما در گستره صفر تا ۷۰ کلوین بر دو زیرتراز انرژی حالت پایه و برانگیخته اول سیستم بررسی شد که نتایج این بررسی در شکل (۶-۲) نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود با افزایش دما تا حدود ۴۵ درجه کلوین، انرژی به تندی افزایش می یابد و سپس با افزایش بیشتر دما تا ۷۰ کلوین ثابت می شود.



شکل ۶-۲ تغییرات انرژی زیر ترازها بر حسب دما برای دو تراز انرژی الف: حالت پایه و ب: برانگیخته اول

حد میزان تغییرات برای انرژی حالت پایه ۰/۵ میلی الکترون ولت و برای حالت برانگیخته اول برابر ۰/۲۵ میلی الکترون ولت است. اگرچه میزان تغییر در انرژی برای هر دو زیر تراز ناچیز به نظر می رسد ولی این مقدار تغییر دما می تواند باعث از بین رفتن قطبش اسپینی سیستم گردد.

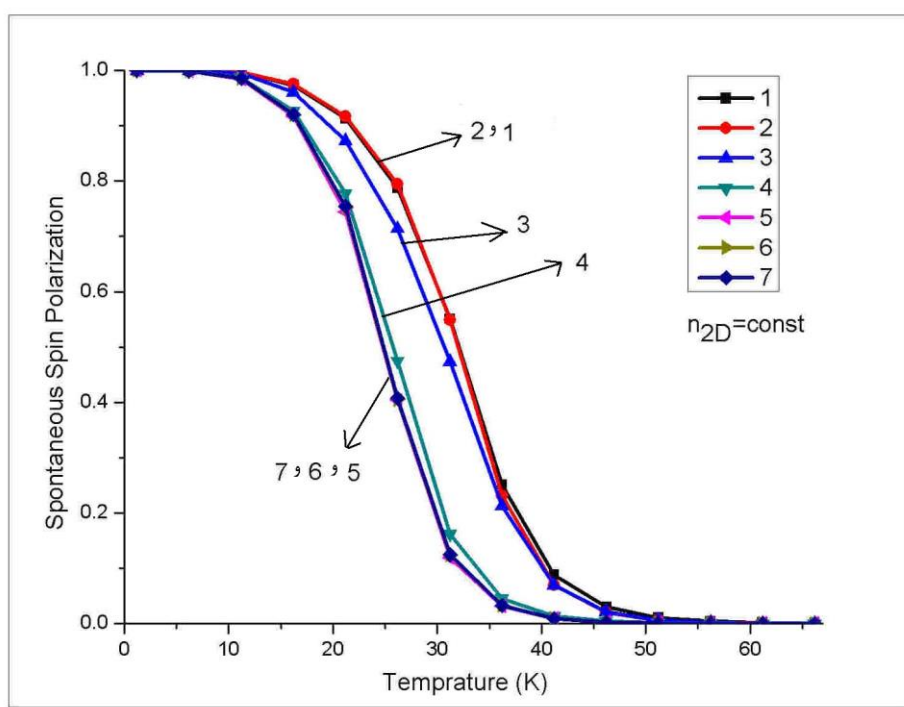
در ادامه این مطالعه تغییرات چگالی ذرات با اسپین بالا و پایین بر حسب دما و موقعیت مکانی در سیستم های چاه کوانتومی چندگانه مفروض نیز بررسی شده اند. در شکل ۳-۶ الف و ۳-۶ ب نمونه ای از نتایج این مطالعه برای سیستم چاه کوانتومی پنج گانه نشان داده شده است.



شکل ۳-۶ نمودار تغییرات چگالی ذرات با اسپین بالا و پایین بر حسب موقعیت مکانی و دما برای یک سیستم چاه کوانتومی چندگانه نوعی (در اینجا پنج گانه)

مقایسه نتایج رفتار چگالی اسپینی بالا و پایین در این سیستم نشان می دهد که در دمای $T=0$ کلون سیستم کاملاً قطبیده اسپینی است (همه الکترونها اسپین پایین دارند). با افزایش دما بر تعداد ذرات با اسپین بالا افزوده شده و همزمان از تعداد ذرات با اسپین پایین کاسته می شود و سرانجام در دمای حدود ۶۰ کلون چگالیهای اسپین های بالا و پایین با هم برابر شده و قطبش اسپینی صفر می شود. بررسی موقعیت مکانی ذرات نشان می دهد که بیشترین حضور در چاه مرکزی و کمترین حضور در چاههای کناری وجود دارد.

افزایش دما می تواند منجر به افزایش افت و خیز دمایی ذرات شده و در نتیجه نظم مغناطیسی اسپینی مختل شود. نابودی نظم مغناطیسی در یک دمای بحرانی که آنرا دمای گذار فرومغناطیسی (دمای کوری) می نامیم رخ می دهد. زیر این دما سیستم نظم فرومغناطیسی دارد و در دماهای بالاتر از این دمای بحرانی مغناطش خودبه خودی از بین می رود و سیستم نظم پارامغناطیسی به خود می گیرد. نمودار تغییرات قطبش اسپینی بر حسب دما برای چاههای کوانتومی چندگانه مختلف در شکل ۴-۶ نشان داده شده است.



شکل ۱۶- تغییرات قطبش خودبخودی بر حسب دما بر تعدادی چاه کوانتومی چند گانه (تا هفت چاه) با طول موثر کلی ثابت. تعداد چاهها در شکل آمده است.

همانطور که در این شکل دیده می شود قطبش اسپینی در دمای حدود ۶۰ کلوین کاملاً از بین می رود. همچنین افزایش تعداد چاه (از ۳ چاه به بعد) باعث می شود که قطبش اسپینی با افزایش دما سریعتر کاهش می یابد.

نتیجه گیری

این مطالعه نشان داد که دما منجر به کاهش انرژی فرمی از مرتبه حدود ۱۰-۱۵ میلی الکترون ولت برای هر سیستم با تعداد چاه بخصوص می شود. ترازهای انرژی فرمی به ازای تعداد چاههای ۴ تا ۷ بسیار به هم نزدیک است پس با افزایش تعداد چاهها از ۴ به بعد دیگر افزایش تعداد چاه تاثیری ندارد. فاصله بین زیرترازهای انرژی سیستم m چاهی و $m+1$ چاهی با افزایش m کاهش می یابد. نمودارهای افزایشی یکنوا مربوط به اثر دما بر دو زیرتراز انرژی حالت پایه و برانگیخته اول می باشد و حد میزان تغییرات برای انرژی حالت پایه ۰/۵ میلی الکترون ولت و برای حالت برانگیخته اول برابر ۰/۲۵ میلی الکترون ولت است. دمایی که در آن قطبش اسپینی گاز الکترون دو بعدی تقریباً به طور کامل از بین می رود حدود ۶۰ درجه کلوین است.

۶-۲ حل خودسازگار معادله شرودینگر - پواسون به روش K.P شش نواره برای

بررسی قطبش اسپینی یک گاز حفره دو بعدی محصور در چاه کوانتومی چند

گانه $\text{GaAs/GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaMnAs}$

۶-۲-۱ مقدمه

بررسی خصلتهای مغناطیسی سیستم های نانوساختار بر پایه ترکیبات نیمرسانای گروه III-V این توجه به دلیل کاربردهای آن در قطعات مغناطیسی نظیر حافظه های مغناطیسی می باشد [۱۶۹]. یک زمینه تحقیقاتی پرتعداد در سالهای اخیر بوده است. این ویژگیهای مغناطیسی از برهمکنشهای وابسته به اسپین حاملهای بار ناشی می شوند [۱۸۳-۱۸۵]. در این تحقیقات، ویژگیهای مختلفی مورد بررسی قرار گرفته است که از آن جمله می توان به بررسی دمای کوری [۱۸۶]، اثر مغناطومقاومت^۱ [۱۸۷]، اشاره کرد. در مطالعات نظری روشهای متفاوتی برای این کار مورد استفاده قرار می گیرد که از آن جمله می توان به شبیه سازی مونت کارلو [۱۸۸]، نظریه موج اسپینی [۱۸۹]، روش حل خودسازگار [۱۹۰] و روش K.P [۱۹۱] اشاره کرد. در این بین روش k.p تقریبی از روش تابع پوش است که قابلیت بررسی ویژگیهای فیزیکی نیمرسانا ها، در نزدیکی کمینه های نوار ظرفیت و رسانش را دارد. در دماهای معمولی تنها الکترونها می توانند در فیزیک مسئله نقش داشته باشند که در نزدیکی این کمینه ها باشند. بنابراین اطلاع از این ویژه انرژی ها و ویژه توابع برای آگاهی از کیمات فیزیکی مورد نظر کافی است. البته با افزایش دقت این ویژه توابع و ویژه مقادیر می توان از دیگر نقاط منطقه بریلوئن هم اطلاع حاصل کرد.

¹ Magneto-resistance

در این کار ما از یک روش $k.p$ شش نواره خودسازگار استفاده کرده ایم تا وابستگی دمای قطبش اسپینی یک گاز حفره دو بعدی را در چاه کوانتومی $GaAs/GaAl_{0.7}As_{0.3}/GaMnAs$ بررسی کنیم. برای اطمینان از صحت محاسبات، همگرایی انرژی و چگالی بار نیز بررسی شده است.

۲-۲-۶ رهیافت محاسبات

گام اول در حل مسئله تعریف یک هامیلتونی مناسب برای سیستم مورد بررسی است. هامیلتونی به کار برده شده در این مطالعه به شکل زیر است:

$$H = H_0 + V_{conf} + V_{s.c.} + v_{xc}^{\sigma}(\zeta) + H_{ex}^{\sigma} \quad (۴-۶)$$

که در تقریب شش نواره $k.p$ این معادله شامل شش معادله جفت شده می باشد. جمله اول در این رابطه جمله $k.p$ می باشد. این جمله را می توان با تقریب های مختلفی مشخص نمود که بر حسب مجموعه توابع پایه مورد استفاده در آنها تقسیم می شوند [۱۹۲]. در این کار ما از هامیلتونی چوانگ^۱ استفاده کرده ایم که با رابطه زیر داده می شود [۱۹۲]:

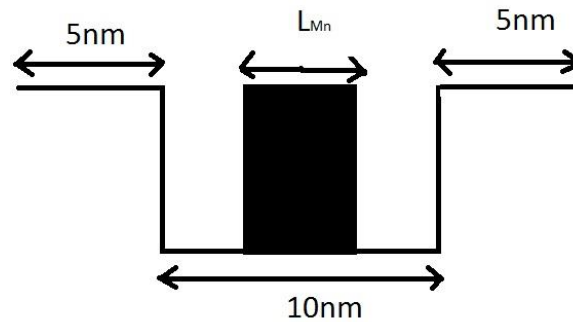
$$H_0 = \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^{\dagger} & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^{\dagger} & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^{\dagger} & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^{\dagger} & S^{\dagger} & P+Q & \sqrt{2}R^{\dagger} & -\frac{1}{\sqrt{2}}S^{\dagger} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S^{\dagger} & \sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^{\dagger} & \sqrt{\frac{3}{2}}S^{\dagger} & \sqrt{2}Q & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \quad (۵-۶)$$

در این ماتریس پارامترهای P و Q و R و S با مجموعه روابط زیر تعریف می شوند:

¹ Chuang

$$\begin{aligned}
 P &= \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\
 Q &= \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) k_z \\
 R &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(-\sqrt{3} \gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + i 2\sqrt{3} \gamma_3 k_x k_y \right) \\
 S &= \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} \sqrt{3} (k_x^2 - i k_y^2)
 \end{aligned} \quad (6-6)$$

درن رابطه پارامترهای γ پارامترهای کوهن-لوتینگر هستند. جمله دوم در هامیلتونی (۴-۶) پتانسیل ناشی از محصور سازی فضا است. همانطور که اشاره شد سیستم مطالعه شده یک چاه کوانتومی یگانه GaAs/GaAl_{0.7}As_{0.3} می باشد که فرض کرده ایم قسمتی از ناحیه وسط چاه با اتم Mn آلاینده شده است. عرض کلی ساختار ۲۰ نانومتر است که شامل یک چاه یگانه ده نانومتری است که با دو سد پنج نانومتری احاطه شده است. در شکل ۶-۸ یک طرح شماتیک از ساختارهای مطالعه شده نشان داده شده است.



شکل ۶-۵ یک طرح شماتیک از چاه کوانتومی مطالعه شده. منطقه آلاینش بطور متقارن در وسط چاه قرار دارد.

جمله سوم در هامیلتونی (۴-۶) پتانسیل هارتری است که از رابطه زیر بدست می آید:

$$\nabla^2 V_{s.c.} = \frac{e^2}{\epsilon_r \epsilon_0} [N_{im} - (p_{\uparrow} + p_{\downarrow})] \quad (7-6)$$

در این رابطه $p_{\uparrow}$ و $p_{\downarrow}$ به ترتیب چگالی گاز حفره دوبعدی با اسپین بالا و پایین و N_{im} چگالی یونهای مغناطیسی آلاینده در سیستم (در این کار منگنز) می باشد. این جمله باید بصورت

خودسازگار در هامیلتونی (۴-۶) مورد استفاده قرار بگیرد تا مقادیر درست $p_{\uparrow}$ و $p_{\downarrow}$ بدست آید.

مقادیر $p_{\uparrow}$ و $p_{\downarrow}$ از رابطه زیر بدست می آید [۱۷۵]:

$$p_n^{\sigma} = \frac{m^* k_B T}{2\pi \hbar^2} |\psi_n^{\sigma}|^2 \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\mu_n^{\sigma} - \varepsilon_n^{\sigma}}{k_B T} \right) \right] \quad (۸-۶)$$

که در آن نماد σ نماینده اسپین بالا یا پایین می باشد. انرژی فرمی (E_F) به ازای یک آلایش بخصوص از شرط خنثایی بار بدست می آید:

$$0 = \int_{All\ Space} \rho_{eff} = \int_{All\ Space} [N_{im} - (p_{\uparrow} + p_{\downarrow})] \quad (۹-۶)$$

جمله چهارم در این هامیلتونی ۴-۶ ترم تبادلی-همبستگی^۱ در تقریب چگالی اسپینی موضعی است. انرژی تبادلی-همبستگی منشا کلاسیک ندارد. برای در نظر گرفتن این جمله در این کار ما از رهیافت ارائه شده در مرجع [۱۷۹] استفاده کرده ایم. جمله پنجم در معادله (۱) جمله برهمکنش تبادلی^۲ است که در اینجا از روش مرجع [۱۹۳] برای اعمال این جمله استفاده کرده ایم. در این مطالعه در ورودی برنامه از مقادیر پیش فرض زیر استفاده شده است:

$$\begin{aligned} & \text{Mn}, N_{Mn}=7.75/\text{nm}^2, N_a=0.1/\text{nm}^2, f=0.85, x_{eff}=0.0875 \text{ برای اتم Mn}, \\ & V_{conf:Mn_Ga}=0.1\text{eV}, \text{ دقت در محاسبه انرژی: } 0.5\text{ meV}, \text{ دقت در محاسبه چگالی ذرات: } \eta = 10^{-8} \end{aligned}$$

نتایج و بحث:

با حل معادله شرودینگر بر پایه هامیلتونی (۴-۶) توابع موج و انرژی های وابسته به اسپین ($\psi_i^{\sigma}(z)$) و E_i^{σ} بدست می آیند. برای یافتن ویژگیهای فیزیکی سیستم معادلات (۴-۶)، (۵-۶)، (۶-۷) و (۸-۶) بطور خودسازگار حل شوند. در این محاسبات شرط خاتمه حلقه خود سازگار می تواند یکی از موارد ذیل باشد:

¹ Exchange-correlation potential

² Exchange interaction Hamiltonian

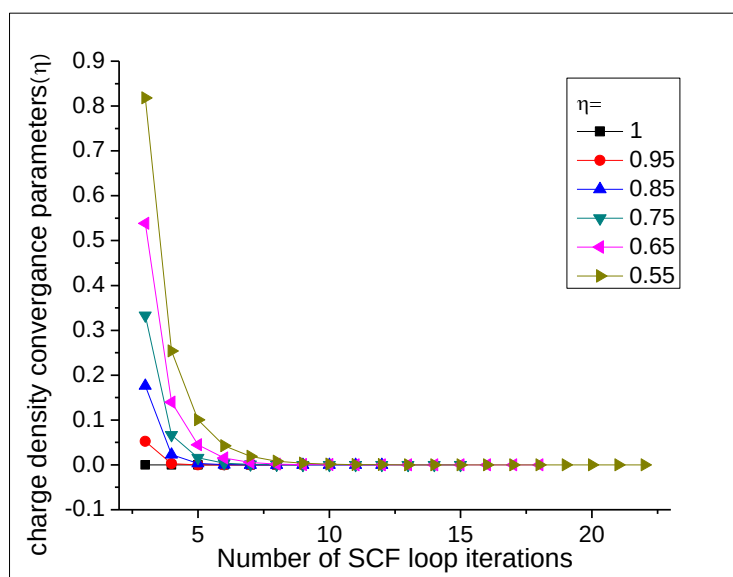
الف) همگرا شدن چگالی های الکترونی: در این روش حلقه خود ساز گار دو بار تکرار می شود و با یافتن توزیع های قدیم N_{old} و N_{new} (که $N = p_{\uparrow} + p_{\downarrow}$) مقدار پارامتر همگرایی چگالی بار η که با رابطه زیر داده می شود محاسبه می گردد :

$$\eta = \frac{\int_{All\ Space} (N_{new} - N_{old})}{\int_{All\ Space} N_{old}} \quad (10-6)$$

اگر η از یک مقدار پیش فرض کمتر شود حلقه خاتمه می یابد در غیر این صورت چگالی الکترونی جدید از رابطه زیر بدست می آید:

$$N = N_{old}(1-f) + N_{new}f, \quad 0 < f < 1 \quad (11-6)$$

به پارامتر f در این رابطه پارامتر ترکیب^۲ گفته می شود. این پارامتر چگالی جدید و قدیم و یا پتانسیل جدید و قدیم را با هم ترکیب می کند و باعث می شود تا با تشکیل یک زنجیره بین آنها به همگرایی مطلوبتری برسیم.



شکل ۶-۶ تغییرات همگرایی چگالی بار بر حسب تعداد تکرار حلقه خود سازگار

¹ Charge density convergence parameter

² Mixing parameter

این بررسی در این کار انجام شد که نتیجه آن (تغییرات همگرایی چگالی بار بر حسب تعداد تکرار حلقه خود سازگار) در شکل (۶-۶) آمده است. همانطور که در این شکل دیده می شود با افزایش تکرار حلقه خودسازگار مقادیر η محاسبه شده همگرا می شوند. این مطلب نشانگر آن است که شرط همگرایی بار برآورده شده است.

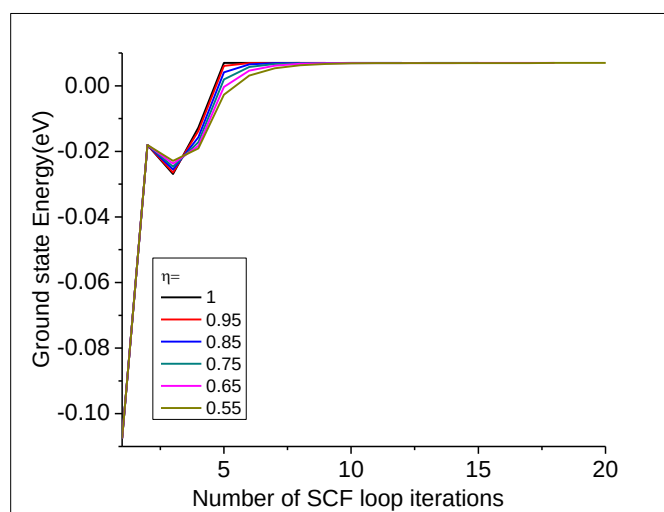
(ب) همگرا شدن پتانسیل هارتری: در این روش حلقه خود ساز دو بار تکرار می شود و با یافتن پتانسیلهای هارتری حلقه قدیم (V_H^{old}) و حلقه جدید (V_H^{new}) مقدار پارامتر η را از رابطه زیر بدست می آوریم:

$$\eta = \frac{\int_{All\ Space} (V_H^{new} - V_H^{old})}{\int_{All\ Space} V_H^{old}} \quad (۱۲-۶)$$

اگر η از یک مقدار پیش فرض کمتر شد حلقه خاتمه می یابد در غیر این صورت پتانسیل هارتری جدید از رابطه زیر حساب می شود

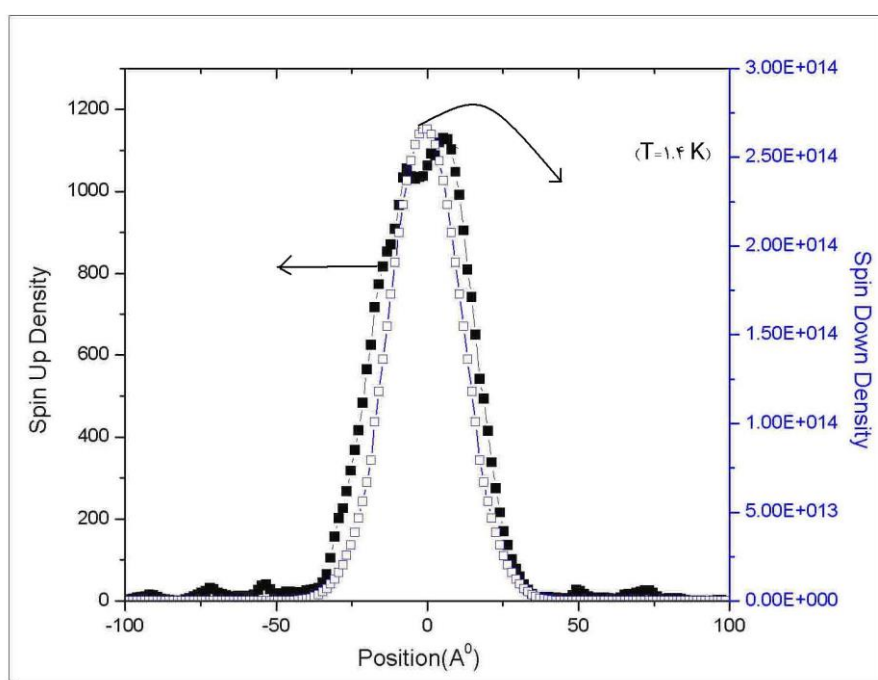
$$V_H = V_H^{old} (1-f) + V_H^{new} f, \quad 0 < f < 1 \quad (۱۳-۶)$$

(ج) همگرا شدن انرژی (مثلا انرژی حالت پایه): در این کار این وضعیت نیز بررسی شد. نتایج این بررسی نشان می دهد که شرط همگرایی انرژی حالت پایه نیز برآورده شده است. تغییرات انرژی حالت پایه بر حسب تعداد تکرار حلقه خود سازگار در شکل (۷-۶) آمده است.



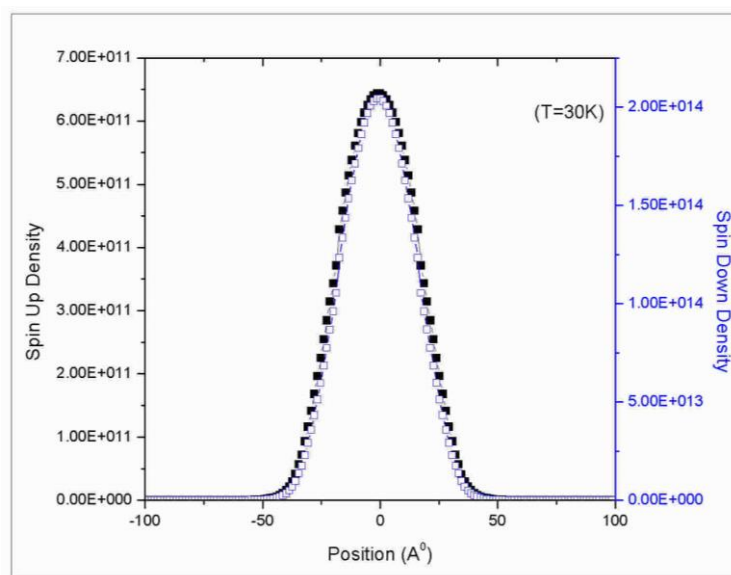
شکل ۶-۷ تغییرات انرژی حالت پایه بر حسب تعداد تکرار حلقه خود سازگار.

در ادامه این کار چگالیهای حاملهای اسپینی بالا و پایین در سیستم چاه کوانتومی $\text{GaAs}/\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}$ با افزایش دما بررسی شده اند. نتایج این بررسی برای دمای $1/4$ کلون در شکل (۸-۶) نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود در این دما چگالی حفره ای اسپین پایین بسیار بزرگتر از حفره های با اسپین بالا هستند (حدود 10^{11} برابر). بنابراین می توانیم بگوییم که در این دما قطبش اسپینی (اسپین پایین) بر سیستم حاکم است. تجمع حفره ها نیز در مرکز چاه بیشتر از جاهای دیگر است.



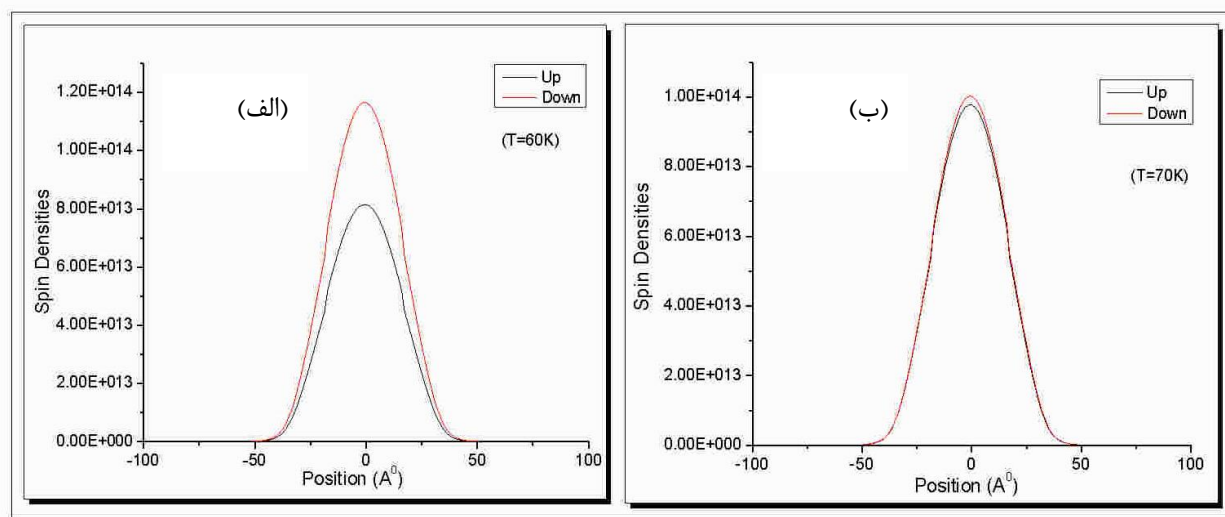
شکل ۸-۶ تغییرات چگالی بار (cm^{-2}) بر حسب موقعیت مکانی ساختار (آنگستروم) $T=1.4\text{K}$

همانطور که در شکل (۹-۶) دیده می شود با افزایش دما تا 30 درجه کلون چگالی حفره های اسپین بالا به شدت افزایش می یابد (10^9 برابر). در این دما چگالی حفره های اسپین پایین حدود 1000 برابر چگالی حفره های اسپین بالا می باشد. بنابراین در این دما نیز هنوز یک قطبش اسپینی خالص (اسپین پایین) در سیستم وجود دارد.



شکل ۹-۶ تغییرات چگالی بار (cm^{-2}) بر حسب موقعیت مکانی ساختار (آنگستروم) $T=30\text{K}$.

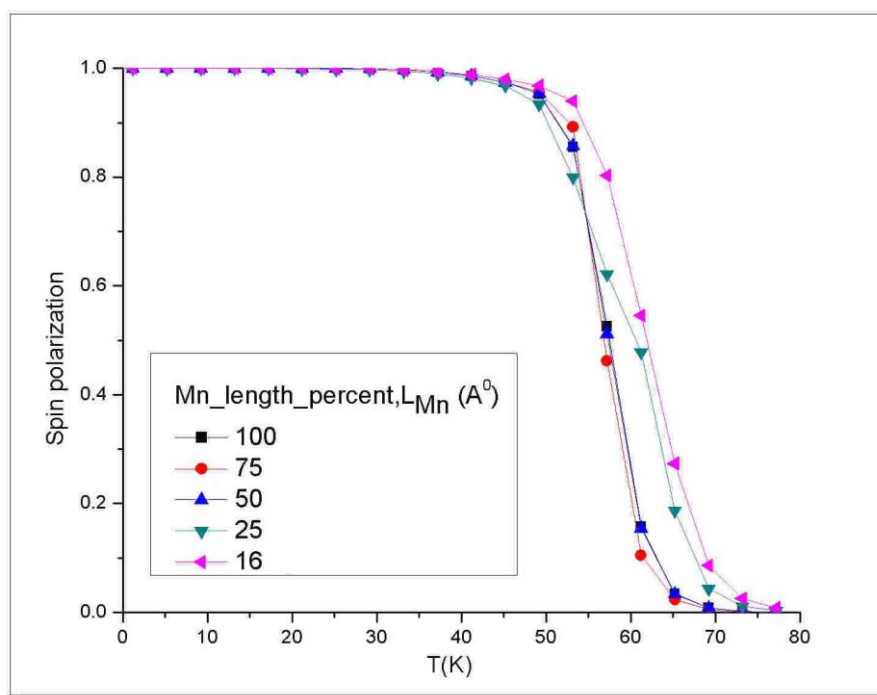
با افزایش دما تا ۶۰ درجه کلین (شکل های ۱۰-۶ الف و ۱۰-۶ ب) روند افزایش چگالی حفره های اسپین بالا ادامه می یابد اما همچنان یک مرتبه بزرگی کمتر از چگالی حفره های اسپین پایین است. افزایش بیشتر دما تا ۷۰ کلین باعث می شود که چگالی حفره های اسپین بالا و پایین تقریباً با هم برابر شده و بنابراین قطبش خالص اسپینی سیستم صفر شود.



شکل ۱۰-۶ تغییرات چگالی بار (cm^{-2}) بر حسب موقعیت مکانی ساختار در دمای الف، ۶۰ کلین و ب) ۷۰ کلین

در ادامه این کار اثر عرض منطقه آلائیده با یونهای منگنز در چاه کوانتومی روی میزان قطبش اسپینی (تفاضل اسپین بالا و پایین) حفره های آزاد بررسی شد. همانطور که اشاره کردیم منطقه

آلایش در چاه در تمام حالات متقارن در نظر گرفته شده است. نتایج این بررسی برای عرضهای آلایش مختلف در شکل ۶-۱۱ نشان داده شده است همچنین طول موثر آلایش در این شکل آمده است. همانطور که در این شکل دیده می شود با افزایش دما تا ۵۰ کلوین قطبش اسپینی سیستم تقریباً ۱۰۰ درصد است. افزایش بیشتر دما باعث می شود قطبش اسپینی به شدت کاهش یافته و تا دمای ۷۵ درجه کلوین تقریباً صفر شود. با افزایش منطقه آلاینده بوسیله اتمهای منگنز از ۱۰/۶ تا ۵۰ نانومتر مشاهده می شود که دمای گذار حدود ۱۵ درجه کلوین کاهش می یابد. با افزایش منطقه آلایش از ۵۰ تا ۱۰۰ نانومتر (کل منطقه چاه) تغییر محسوسی در دمای گذار مشاهده نمی شود.



شکل ۶-۱۱ تغییرات قطبش اسپینی حفره های آزاد بر حسب دما برای عرض های مختلف منطقه آلایش مغناطیسی در چاه کوانتومی یگانه.

نتیجه گیری

با کمک روش $k.p$ شش نواره بطورخودسازگار وابستگی دمایی ویژگیهای مغناطیسی حفره های آزاد در یک سیستم چاه کوانتومی $Al_{0.3}GaAs_{0.7}/GaMnAs/GaAs$ بررسی شد. برای

اطمینان به نتایج همگرایی انرژی و چگالی بار مورد بررسی قرار گرفت. در دمای $1/4$ کلوین حفره های آزاد کاملاً قطبیده بودند و اکثریت آنها اسپین پایین داشتند. با افزایش دما تا 70 درجه کلوین قطبش اسپینی تقریباً از بین رفت. همچنین افزایش منطقه آرایش در چاه منجر به کاهش دمای کوری از مرتبه 10 درجه می شود ولی از 50 نانومتر به بعد دیگر کاهشی در دمای کوری مشاهده نگردید. در این بخش 1400 خط برنامه $C++$ روی روش نظریه تابعی چگالی اسپینی وابسته به دما و همچنین 2600 خط برنامه $C++$ روی روش حل خودسازگار معادله شرودینگر- پواسون به روش K.P شش نواره در تقریب های LSDA و Hartree برای بررسی یک گاز حفره دو بعدی نوشته شد.

پیوست الف: آماده کردن ورودی های برنامه الگوریتم ژنتیک

```
Angstrom=pow(10,-10);
//***** computational quantities
Giter=100
Num_mesh_ze=10;
Num_mesh_zh=10;
Num_mesh_rho=10;
desendentnummber=100
desendentnummber1=100
paradim=1000;
mutprob=40
mutprob_by_rand=0
elitisismpercent=10
epsilonpercent=0;
epsilondivision=10;
averaging_energy_number=1
//***** geometrical parameters
rhomin=0.5*Angstrom
rolimit=2*pow(10,1)
L=60 *Angstrom;
L1=-L/2;
Lb=3000*Angstrom
tunel_to_infinity =1
mintunnelacc=pow(10,-25
x=float(0.3)
Egap1=1.5196
Egap2=1.1
Vconfze=10*pow(10,-3)
Vconfzh=(Egap1-Egap2)-Vconfze;
printwavefunction=1;
```

```

devisionplot=50
cross_sections=5
//***** magnetic filed application data
double Bmin=0
Bmax=30
binterval=2
//***** constant physical paramaters in gaussian unites
//SI
pi=3.14159265358979328;
m0=9.10938188*pow(10,-31);
hbar=1.05457266*pow(10,-34);
c=2.99792458*pow(10,8);
e=1.6021773*pow(10,-19)
epsilon00=8.854187818*pow(10,-12);
//Gaussian
m0_G=9.1093897*pow(10,-28);
hbar_G= 1.05457266*pow(10,-27);
c_G=29979245800;
e_G=4.8032068*pow(10,-10);
epsilon00_G= 1;
//***** material parameters
g1=6.98;
g2=2.06;
me1=0.067*m0;
epsilon01=12.5*epsilon00;
g11= 13.4;
g22=4.7;
me2=0.042*m0;
epsilon02=15.7*epsilon00;
//***** bisections root finding parameters
JMAXtot 40
xacc=pow(10,-10);

```

نمایی از محیط برنامه و همچنین تابع یافتن ریشه در شکل الف-۱ آمده است:

```

double rtbis(double (*func)(double), double x1, double x2, double xacc)
/*Using bisection, func known to lie between x1 and x2. The root,
returned as rtbis, will be rexacc.*/
{
    void nerror(char error_text[]);
    int j;
    double dx, f, fmid, xmid, rtb;

    f=(*func)(x1);
    fmid=(*func)(x2);
    if (f*fmid >= 0.0)
        return rtb=-1;

    //nerror("Root must be bracketed for bisection in rtbis");

    rtb = f < 0.0 ? (dx=x2-x1,x1) : (dx=x1-x2,x2); //Orient the search so that f>0

    for (j=1;j<=JMAX;j++)
    {
        //lies at x+dx.
        fmid=(*func)(xmid=rtb+(dx *= 0.5)); //Bisection loop.
        if (fmid <= 0.0)
            rtb=xmid;

        if (fabs(dx) < xacc || fmid == 0.0)
            return rtb;
    }
    nerror("Too many bisections in rtbis");
    return 0.0; //Never get here.
}

```

شکل الف-۱: نمایی از محیط برنامه و تابع یافتن ریشه.

مراجع

- [1] Kittel C. (2005), "**Introduction to Solid State Physics**", EIGHTH EDITION, John Wiley and sons.
- [2] Solyom J. (2009), "**fundamentals of the physics of solids**", volume II Electronic Properties (Electronic Properties), Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [3] Yariv A. "**Quantum electronics**" (1989) Wiley.
- [4] Weisbuch C., Vinter B. (1991), "**Quantum semiconductor structures: Fundamentals and applications**", Academic Press, London.
- [5] Keldysh, L. V. (1962) "Effect of ultrasonics on the electron spectrum of crystals," Sov. Phys. Solid state, **4**, **1658**.
- [6] Esaki L. and Tsu R. (1969) "Superlattice and negative conductivity in semiconductors," IBM res. note RC-2418.
- [7] Frenkel J. (1931), Phys. Rev. **37**, **17**.
- [8] Gross E.F., Zakharchenia B.P., and Reinov N.M. (1954), Doklady of the Academy of Sciences of USSR **111**, **564**.
- [9] Wannier G.H. (1937), Phys. Rev. **52**, **191**.
- [10] Zhu J. L. (1988) Phys. Rev. B **39**, pp **8780**.
- [11] Kumar A., Csathy G. A., Manfra M. J., Pfeiffer L. N., and West K. W. (2010), Physical Review Letters 105, 246808.
- [12] Physhkin K., Ford C.J.B., Harrell R.H., Pepper M., Linfield E.H., Ritchie D.A. (2000), Phys. Rev. B 62, pp 15842.
- [13] <http://nobelprize.org/physics/laureates/1985/index.html>
- [14] <http://nobelprize.org/physics/laureates/1998/>
- [15] Jaros M. (1985), Rep. Prog. Phys. **48**, **1091**.
- [16] Fox A. M., Huttner H., Pyan J. F., Pate M. A. and Roberts J. S. (1994), Phys. Rev. A, **50**, pp **4415**.
- [17] Guan D., Ravaioli U., Peralta X. G., Allen S. J. and Wanke M. (2004), Semicond. Sci. Technol. **19**, pp **S446**.
- [18] Aeberhard U. and Morf R. H. (2008), Phys. Rev. B **77**, pp **125343**.

- [19] Alves F. D. P., Karunasiri G., Hanson N., Byloos M., Liu H.C., Bezinger A., Buchanan M. (2007), *Infrared Physics & Technology* **50**,pp **182**.
- [20] Perera A.G.U., Jayaweera P.V.V., Ariyawansa G., Matsik S. G., Tennakone K., Buchanan M., Liu H.C., Su X.H., Bhattacharya P. (2009), *Microelectronics Journal* **40**,pp **507**.
- [21] Sugakov V. I. and Vertsimakha G. V. (2010), *Phys. Rev. B* **81**,pp **235308**.
- [22] Li E. H. (1997), *J. Appl. Phys.***82**,pp **6251**.
- [23] Sirtori C. , Capasso F. , Sivco D. L. , Chu S. N.G., and Cho A.Y.(1991), *Appl. Phys. Lett.* **59**,pp **2302**.
- [24] Ahland A., Wiedenhaus M., Schulz D., and Voges E. (2000), *IEEE J. Quant. Elec.* **36**,pp **842**.
- [25] Jackson J. D. (1998), "**Classical Electrodynamics**".
- [26] Mahan G. D. (2007), "**Many Particle Physics**".
- [27] Harrison P. (2005), "**QUANTUM WELLS, WIRES AND DOTS, Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures**" JOHN WILEY & SONS.
- [28] Franceschetti A. and Zunger A. (1997), *Phys. Rev. Lett.* **78**,**915**.
- [29] Noack R. M. and Manmana S. R., "**Diagonalization- and Numerical Renormalization-Group-Based Methods for Interacting Quantum Systems**" <https://computing.llnl.gov>.
- [30] Grochol M., Diploma Thesis(2003), "Luminescence spectroscopy of semiconductor quantum structures" Charles University, Prague, Czech Republic.
- [31] https://computing.llnl.gov/tutorials/parallel_comp/.
- [32] Koza, J. R., (1999), "**Genetic Programming III: Darwinian Invention and Problem Solving**" San Francisco: Morgan Kaufmann.
- [33] Schwefel H.-P. (1993), "**Evolution and Optimum Seeking, the Sixth Generation Computer Technology Series**" JohnWiley & Sons, New York, USA.
- [34] Rechenberg I. (1971), PhD. Thesis, " ", Department of Process Engineering, Technical University of Berlin.
- [35] Holland, John H (1975), "**Adaptation in Natural and Artificial Systems**", University of Michigan Press, Ann Arbor.

- [36] Goldberg D. E. ,(1989), "**Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning**" Addison-Wesley Professional; first edition.
- [37] Sayle D. C., Johnston R. L. (2003), Current Opinion in Solid State and Materials Science, **7**, pp **3**.
- [38] Gottwald D., Kahl G., Likos C. N. (2005), J. Chem. Phys. **122**, pp **204503**.
- [39] Soong C. Y., Huang W. T., Lin F. P., Tzeng P. Y., (2004), Phys. Rev. E **70**, pp **016211**.
- [40] Grigorenko I., Garcia M. E. (2002),, Physica A, **313**, pp **463**.
- [41] Bukkapatnam S., Malshe M., Agrawal P. M., Raff L. M., and Komanduri R. (2006), phys. Rev.B **74**, pp **224102**.
- [42] Briggs R. M. and Ciobanu C. V. (2007), Phys. Rev. B **75**, pp **195415**.
- [43] Abraham N. L. and Probert M. I. J. (2006), Phys. Rev. B **73**, pp **224104**.
- [44] Jove D. A., Tedesco E., Harris K. D. M. (2001), CRYSTAL GROWTH & DESIGN, **1**, pp **425**.
- [45] Burgess G. (1999), "Finding Approximate Analytic Solutions to Differential Equations Using Genetic Programming", DSTO Electronics and Surveillance Research Laboratory, Australia.
- [46] Dixit V., Liu H. F. and Xiang N. (2008), J. Phys. D: Appl. Phys. **41**, pp **115103**
- [47] Kumar S., Akshaya Moi S., Puttamadappa C., De A.K. , Naskar M.K. (2003), Physica B **325**, pp **189**
- [48] SHARMA R., NANDY S. and BHATTACHARYYA S., RAMANA P. (2006), journal of physics, **66**, pp **1125**
- [49] Saha R. and Bhattacharyya S. P. (2004),CURRENT SCIENCE, **86**, pp **10**
- [50] Winkler C. and Hofmann H. M. (1997), phys. Rev. c, **55**, pp **684**
- [51] Ren G. B. and Rorison (2004) J. M. Phys. Rev. E **69**, pp **036705**.
- [52] Anderson (1975)J. B., J. Chem. Phys, **63**, pp **1499**.
- [53] Makarov D. E. and Metiu H. (2000) J. Phys. Chem. A, **104**, pp **8540** .
- [54] Saha R. and Bhattacharyya S. P. (2004) CURRENT SCIENCE, **86**, pp **10**.

- [55] ozmen A., Yakar Y., Cakir B., Atav U. (2009) Optics Communications **282**, pp **3999**.
- [56] Hai-Qing Y., Chen T., Ming L. (2005) and Hao Z., Commun. Theor. Phys. (Beijing, China) **44**, pp **727**.
- [57] Martin-Delgado M. A. , Sierra G.,and Noac R. M ., (1999)J. Phys. A: Math. Gen. 32, **pp 6079**.
- [58] Porras-Montenegro N., Perez-Merchancano S.T. (1992) Phys. Rev. B **46**, pp **9780**.
- [59] Varshni Y.P. (1998) Superlattices Microstruct. **23**, pp **145**.
- [60] Szafran B., Adamowski J., Bednarek S. (1999) Physica E **4**, pp **1**.
- [61] Marin J.L., Cruz S.A. (1991) J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **24**, pp **2899**.
- [62] Bose C., Sarkar C.K. (1998) Physica B **253**,pp **238**.
- [63] Singh J. (1986), J. Appl. Phys, **59**, pp **2953**.
- [64] Zhu J.L., Xiong J.J., Gu B.L. (1990) Phys. Rev. B **41**, pp **6001**.
- [65] Huang Y.S., Yang C.C., Liaw S.S. (1999) Phys. Rev. A **60**, pp **85**.
- [66] Krause J. L., Reitze D. H., Sanders G. D., Kuznetsov A. V., Stanton C. J. (1998) Phys. Rev. B **57**, pp **9024**.
- [67] Khreis O.M., Al-Kofahi I. S. (2005) Superlattices and Microstructures 37, pp **193**.
- [68] Kumar Sarkar S., Moi A., Puttamadappa C., De A.K., Naskar M.K. (2003) Physica B **325**, pp **189**.
- [69] Gomez-Campos F.M., Rodrguez-Bolvar S., de Jong van Coevorden C.M., Luque-Rodrguez A., Lara-Bullejos P., Carcelle J.E. (2009) Physica E **41**, pp **1712**.
- [70] B Cakr., Yakar Y., Ozmen A., Sezer M. O., Sahin M. (2010) Superlattices and Microstructures **47**, pp **556**.
- [71] Froemming N. S. and Henkelman G. (2009) J. Chem. Phys. **131**, pp **234103**.
- [72] Stucke D. P. and Crespi V. H. (2003) NANO LETTERS, **3**, pp **1183**.
- [73] Jia J., Shi D., Wang B., Zhao J. (2006) Phys. Rev. B **74**, **205420**.

- [74] Wang B., Yin S., Wang G., Buldum A., and Zhao J. (2001) Phys. Rev. Lett. **86**, pp **2046**.
- [75] Deaven D. M., Ho K.M. (1995) Phys. Rev.Lett, **75**, pp **288**,
- [76] Bazterra V. E., Ona O., Caputo M. C., Ferraro M. B., Fuentealba P., Facelli J. C. (2004) Phys. Rev. A **69**, pp **053202**
- [77] Ona O., Bazterra V. E., Caputo M. C., Ferraro M. B., Facelli J. C. (2005) Phys. Rev. A **72**, pp **053205**
- [78] Sun Z., Liu Q., Li Y., Zhuang J. (2005) Phys. Rev. B **72**, pp **115405**
- [78] Marim L.R., Lemes M.R., Dal Pino Jr A. (2003) Journal of Molecular Structure (Theochem) **663**, pp **159**
- [80] Zhang H., Tian D. (2008) Computational Materials Science **42**, pp **462**
- [81] Senger R.T., Bajaj K. K., Jones E. D., Modine N. A., Waldrip K. E., F Jalali., Klem J. F., Peake G. M., Wei X., Tozer S. W. (2003) Appl. Phys. Lett, **29**, pp **2614**.
- [82] Chaves A., Costa e Silva J., Freire J. A. K., and Faria G. A. (2007), J. Appl. Phys. **101**, pp **113703**.
- [83] Zhang Y., Shi L. j., Jin G., and Zou B. (2010), J. Appl. Phys. **107**, pp **053527**.
- [84] RYCZKO K., Sek G., and Misiewicz J. (2002), Solid State Commun., **122**, pp **323**.
- [85] Greene R. L., Bajaj K.K. (1985), Phys. Rev. B **31**, pp **6498**.
- [86] Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W T., Flanner B. P. (2007) "NUMERICAL RECIPES", Third Edition, CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS.
- [87] Harrison P. (2005), "QUANTUM WELLS, WIRES AND DOTS, Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures", JOHN WILEY & SONS.
- [88] Singh J. (1995), "Semiconductor optoelectronics-physics and technology", McGraw-Hill Series in Electrical and Computing an Engineering.
- [89] Hai-Qing Y., Chen T., Ming L., and Hao Z. (2005)., Commun. Theor. Phys. (Beijing, China) **44**, pp **727**.
- [90] NAKAJIMA Y. and ABE A. (2000), Japan J. Indust. Appl. Math., **17**, pp **403**.

- [91] Bhaskar V., Gupta S. K., and Ray A. K. (2000), AICHE Journal, **46**, **1046**.
- [92] Lee S. G., Khoo L. P. and Yin X. F. (2000), Int. J Adv. Manuf. Technol. **16**, pp **220**.
- [93] Din D.R., Tseng S.S. (2002), Computer Commun. **25**, pp **1536**.
- [94] Kumar Agrawal R., Pratihar D.K., Roy Choudhury A. (2006), Inter. J. Mach. Tool. & Manufac. **46**, pp **811**.
- [95] Carro-Calvo L., Salcedo-Sanz S., Portilla-Figueras J. A., Ortiz-Garcia E.G. (2010), J. of Net. and Comp. Applic. **33**, pp **375**
- [96] Ferreira E.C., da Costa J.A.P., Freire J.A.K., Farias G.A., Freire V.N. (2002), Applied Surface Science **190**, pp **191**.
- [97] Brum J.A. and Bastard G. (1985), Phys. Rev. B, **31**, **3893**.
- [98] Lu N.H. , Hui P.M. and Hsu T.M. (1991), Solid State Communications, **78**, **145**.
- [99] Chaves A., Costa e Silva J., Freire J. A. K., and Faria G. A. (2007), J. Appl. Phys. **101**, **113703**.
- [100] Zhang Y., Shi L.j., Jin G., and Zou B. (2010), J. Appl. Phys. **107**, **053527**.
- [101] www.netlib.org
- [102] Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. W., and Teller E. (1953), J. Chem. Phys. **21**,pp **1087**.
- [103] S Koonin. E. (1986), "*Computational Physics*", Addison Wesley.
- [104] Binder K. and Heermann D. W., (1997), "**Monte Carlo Simulation in Statistical Physics**", Solid State Sciences, Vol. **80**, Springer, Berlin.
- [105] Lindern W. V. (1992), Phys. Rep. **220** ,pp **53**.
- [106] P. R. C. Kent, Ph.D. thesis, *Techniques and Applications of Quantum Monte Carlo*, University of Cambridge (1999)
- [107] Brum J. A., Bastard G. (1985), Phys. Rev. B **31**,pp **3893**.
- [108] Kavokin A. V., Kokhanovski S. I., A Nesvizhki. I., Sasin M .E., Sesyan R. P., Ustinov V. M., Egorov A. Y., Zhukov A. E., and Gupalov S. V. (1997), Semiconductors, **31**,pp **950**.

- [109] Oliveira C. L. N., Freire J. A. K., Freire V.N., Farias G.A. (2004), Appl. Surf. Sci. **234**, pp **38**.
- [110] Kleinman D. A. (1983), Phys. Rev. B **28**, pp **871**.
- [111] Dawson P., Moore K.J., Duggan G., Ralph H. I. and Foxon C. T. B. (1986), Phys. Rev. B **34**,pp **6007**.
- [112] Lee J., Vassell M.O., E Koteles.S. and Elman B. (1989), Phys. Rev. B **39**,pp **10133**.
- [113] Bastard G., Mendez E. E. , Chang L. L. and Esaki L. (1982) , Phys. Rev. B **26**, pp **1974**.
- [114] Lu N.H. , Hui P.M. and Hsu T.M. (1991), Solid State Commun., **78**, **145**.
- [115] Zheng X. L., Heiman D. and Lax B. (1989), Phys. Rev. B **40**, pp **10523**.
- [116] Lee K. S., Aoyagi Y. and Sugano T., (1992), Phys. Rev. B **46**, pp **10269**.
- [117] Liu J.J., Zhang S.F., Li Y. X., and Kong X.J. (2001), Eur. Phys. J. B **19**,pp **1720**.
- [118] Kleimann D. A. (1983), Phys. Rev. B **28**,pp **871**.
- [119] Rubinstein R.Y. (1981), "Simulation and the Monte Carlo Method", John Wiley & Sons, chapter 4.
- [120] Hilton C. P., Hagston W. E. and Nicholls J. E. (1992), Phys. A: Math. Gen. **25**, pp **2395**.
- [121] Zheng X. L., Heiman D. and Lax B. (1989), Phys. Rev. B **40**, pp **10523**.
- [122] Ballet P., Disseix P., Leymarie J., Vasson A., Vasson A.M., and Grey R. (1997), Phys. Rev. B **56**,pp **15202**.
- [123] Greene R. L., Bajaj K.K. (1983), Solid state. Commun. **45**,pp **831**.
- [125] Greene R. L., Bajaj K.K., and Pheleps D. W., (1984) Phys. Rev. B **29**, pp **1807**.
- [125] Greene R. L., Bajaj K.K. (1985), Phys. Rev. B **31**,pp **6498**.
- [126] Wu J. W. and Nurmikko A. V., (1988),Phys. Rev. B **38**, pp **1504**.
- [127] Galbraith I. (1992), Phys. Rev. B **45**,pp **6950**.

- [128] Chang S.K., Nunnikko A. V., I.W. Wu , Kolodziejski L.A. and Gunshor R. L. (1988), Phys. Rev. B **37**, pp **1191**.
- [129] Wu J. W.(1988) , Solid State Commun. **67**, pp **911**.
- [130] Xiaowu H., Jiahua H. , Kaiyi Q., Zhongyong L. (1992), Chinese Phys. Lett. **9**, pp **202**.
- [131] Kasapoglu E., Sari H., Ergun Y., Elagoz S., N Balkan., Sokmen I. (1999), Tr. J. of Phys. **23**, pp **765**.
- [132] Kasapoglu E., Sokmen I. (2007), Phys. Lett. A **372**,pp **56**.
- [133] Bellabchara A., Lefebvre P., Christol P. and Mathieu H. (1994), Phys. Rev. B **50**, pp **11840**.
- [134] Shinozuka Y. and Matsuura M. (1983), Phys. Rev. B **28**,pp **4878**.
- [135] Stebe B., Stauffer L. and Fristot D. (1993), JOURNAL DE PHYSIQUE, **3**,pp **417**.
- [136] Trzeciakowski W. and Roth A.P. (1989), Superlattices and Microstructures, **6**, pp **315**.
- [137] Ashok S. and Pande K.P., (1985) Solar Cells **141**, pp **61**
- [138] Wang R.Z., Guo K.X., Liu Z., Chen B., Zheng Y.B. (2009), Phys. Lett. A **373**,pp **795**.
- [139] Hoyer W., Ell C., Kira M., and Koch S. W., Chatterjee S., Mosor S., Khitrova G., and Gibbs H. M., Stolz H. (2005), Phys. Rev. B **72**,pp **075324**.
- [140] Chuang S.L., Rink S. S., Miller D. A. B., Chemla D. S. (1991), Phys. Rev. B **43**,pp **1500**.
- [141] Lucarini V., Saarinen J. J., Peiponen K.E., Vartiainen E. M. (2005), "Kramers-Kronig Relations in Optical Materials Research" Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [142] Vurgaftman I., Hinckley J. M., and Singh J. (1994), IEEE J. Quant. Elec. **30**,pp **75**.
- [143] Yang Z., Li R., Wei Q., Yu T., Zhang Y., Chen W., and Hu X. (2009), Appl. Phys. Lett. **94**,pp **061120**.
- [144] Santiago R. B., Guimaraes L.G. (2002), solid state electronics **46**,pp **89**.

- [145] Ozturk E., Sokmen I. (2003), Solid State Commun. **126**,pp **605**.
- [146] Ghatak A. K., Goyal I. C., and Gallawa R.L. (1990), IEEE J. Quant. Elec. **26**,pp **305**.
- [147] Wong K-M. and Allsopp D. W. E. (2009), Semicond. Sci. Technol. **24**,pp **045018**.
- [148] Latge A., Pacheco M. and Barticevic Z. (2002), Semicond. Sci. Technol. **17**,pp **952**.
- [149] Ahn D. and Chuang S. L. (1987), Phys. Rev. B **35**,pp **4149**.
- [150] Ahn D., Chuang S.L. (1987), IEEE J. Quant. Elec. QE-**23**,pp **2196**.
- [151] Jang Yoo K. H., Ram-Mohan L. R., (2007)J. of the Korea. Phys. Soc. **50**,pp **834**.
- [152] Kliros G.S. (2009), Physica E **41**,pp **1789**.
- [153] Manasreh O., "Semiconductor heterojunctions and nanostructures", McGraw Hill.
- [154] Ferry D. K., Goodnick S. M., Bird J. (2009), "Transport in nanostructures", Cambridge University Press, page **40**.
- [155]Yang , Xu J. M. , Sweeny M. (1994), Phys. Rev. B **50**, **7474**.
- [156] Liu A. (1996) J. Appl. Phys. **80**, **1928**.
- [157] Saikin S. (2004), J. Phys.: Condens. Matter **16**, **5071**.
- [158] Bolcatto P. G., Proetto C. R. and Reboredo F. A.,(2003), Phys. Rev. B, **67**, **073304**.
- [159] Ghosh A., Ford C. J. B., Pepper M., Beere H. E. and Ritchie D. A. (2004), Phys. Rev. Lett., **92**, **116601**.
- [160] Goni A. R., Giudici P., Reboredo F. A., Proetto C. R., Thomsen C., Eberl K. and Hauser M. (2004), Phys. Rev. B, **70**, **195331**.
- [161] Phelps C., Sweeney T., Cox R., and Wang H. (2009), Phys. Rev. Lett. 102, 237402.
- [162] Pant M. M. and Rajagopal A. K. (1972), Solid State Commun. **10**, **1157**.
- [163] Kohanoff J. and Gidopoulos N.I. (2003), "Density Functional Theory: Basics, New Trends and Applications", Handbook of Molecular Physics and

Quantum Chemistry, Edited by Stephen Wilson. Vol **2**: Molecular Electronic Structure. John Wiley & Sons, Ltd. Chapter **26**.

[164] Chari M.V.K., Salon S.J. (2000), "**Numerical Methods in Electromagnetism**", Academic Press.

[165] Ashok A., Akis R., Vasileska D., Ferry D. K. (2005), Microelectronics Journal **36**, pp **460**.

[166] A. G. Mal'shukov and K. A. Chao, phys. Rev. B **71**, **121308** (2005).

[167] Vurgaftman I. and Meyer J. R. (2001), phys. Rev. B **64**, **245207**.

[168] Useinov A. N. and Kosel J., Useinov N. Kh. and Tagirov L. R. (2011), phys. Rev. B **84**, **085424**.

[169] Enaya H., Semenov Y. G., Zavada J. M., and Kim K. W. (2008), J. Appl. Phys. **104**, **084306**.

[170] Strelkov N., A Vedyayev., Ryzhanova N., Gusakova D., Buda-Prejbeanu L. D., Chshiev M., Amara S., de Mestier N., Baraduc C., and Diény B. (2011), phys. Rev. B **84**, **024416**.

[171] Boselli M. A., Ghazali A., da Cunha Lima I. C. (2000), phys. Rev. B **62**, **8895**.

[172] Frustaglia D., König J., and MacDonald A. H. (2004), B 70, **045205**.

[173] Ashok A., Akis R., Vasileska D. and Ferry D. K. (2005), J. Comput. Elect. **4**, **125**.

[174] Lew L. C., Voon Y., Willatzen M. (2009), "**the k·p Method: Electronic Properties of Semiconductors**", Springer-Verlag Berlin Heidelberg.

[175] Rosencher E. and Vinter B. (2002), "**Optoelectronics**", Cambridge University Press, London.

[176] Sun J. P., Mains R. K., Yang K., and Haddad G. I. (1993), J. Appl. Phys. **74**, pp **5053**

[177] Kane E.O. (1957), J. Phys. Chem. Solids **1**, pp **249**.

[178] Liu J.J., S Zhang.F., Li Y . X ., and Kong X.J. (2001), Eur. Phys. J. B **19**, pp **1720**.

[179] Gunnarsson O. and Lundqvist B. I. (1976), Phys. Rev. B **13**, **4274**.

- [180] von Barth U. and Hedin L. (1972), J. Phys. C **5**, **1629**.
- [181] Pant M. M. and Rajagopal A. K. (1972), Solid State Commun. **10**, **1157**.
- [182] Kohanoff J. and Gidopoulos N.I. (2003), "**Density Functional Theory: Basics, New Trends and Applications**", Handbook of Molecular Physics and Quantum Chemistry, Edited by Stephen Wilson. Vol **2**: Molecular Electronic Structure. John Wiley & Sons, Ltd. Chapter **26**.
- [183] Tang C. S., Malshukov A. G., and Chao K. A. (2005), phys. Rev. B **71**, **195314**.
- [184] Glazov M. M., Sherman E. Ya., Dugaev V. K. (2010), Physica E **42**, **2157**.
- [185] A. G. Mal'shukov and K. A. Chao, phys. Rev. B **71**, **121308** (2005).
- [186] Vurgaftman I. and Meyer J. R. (2001), phys. Rev. B **64**, **245207**.
- [187] Useinov A. N. and Kosel J., Useinov N. Kh. and Tagirov L. R. (2011), phys. Rev. B **84**, **085424**.
- [188] Strelkov N., A Vedyayev., Ryzhanova N., Gusakova D., Buda-Prejbeanu L. D., Chshiev M., Amara S., de Mestier N., Baraduc C., and Dieny B. (2011), phys. Rev. B **84**, **024416**.
- [189] Boselli M. A., Ghazali A., da Cunha Lima I. C. (2000), phys. Rev. B **62**, **8895**.
- [190] Frustaglia D., Konig J., and MacDonald A. H. (2004), B 70, **045205**.
- [191] Ashok A., Akis R., Vasileska D. and Ferry D. K. (2005), J. Comput. Elect. **4**, **125**.
- [192] Lew L. C., Voon Y., Willatzen M. (2009), "**the k·p Method: Electronic Properties of Semiconductors**", Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [193] Jaros M. (1985), Rep. Prog. Phys. **48**, **1091**.
- [194] Filinov A.V., Riva C., Peeters F.M., Lozovik Yu. E., and Bonitz M. (2004), Phys. Rev. B **70**, **035323**.
- [195] Lent C.S., Kirkner D.J. (1990), J. Appl. Phys. **67**, **6353**.
- [196] Frensley W.R., Quantum Transport ch. 9, in: N.G. Einspruch, W.R.Frensley (Eds.), "**Heterostructure and Quantum Devices, a Volume of VLSI Electronics: Microstructure Science**", Academic Press, San Diego, (1994), **273**.

Abstract

In this dissertation, electronic, optical and magnetic properties of nanostructures based on III-V group semiconductors have been studied by some computational methods. This investigation have been done by Monte Carlo method, hybrid genetic algorithm-Monte Carlo-variational method, biased genetic algorithm-Monte Carlo-variational method (combination with extrapolation method), finite difference method, transfer matrix method, quantum transmitting boundary method, temperature dependent spin density functional theory and self consistent six band K.P method. In chapters two and three of this thesis, the algorithm of the hybrid methods have been described. In the chapter four, optical properties of $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$ and GaN/AlN multiple quantum wells with constant total effective length have been investigated by means of the compact density matrix method. The effect of the magnetic field on optical properties and oscillator strength of these systems were also studied. In the chapter five, miniband formation procedure for constant total length GaN/AlN superlattices have been investigated by using of the finite difference and transfer matrix methods. Then, spin up and down transmission coefficients and spin polarization of the $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$ multiple quantum wells in the presence of the Dresselhaus spin orbit interaction have also been calculated. In the chapter six, the behavior of a two dimensional electron gas confined within $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}$ multiple quantum wells have been studied. Moreover In this chapter spin polarization of a two dimensional hole gas confined within $\text{GaAl}_{0.7}\text{As}_{0.3}/\text{GaAs}/\text{GaMnAs}$ quantum wells has also been investigated by means of a self consistent six band K.P method.

Keywords:

Semiconductor nanostructures, III-V group semiconductors, computational hybrid methods, finite difference method, transfer matrix method, quantum transmitting boundary method, temperature dependent spin density functional theory and self consistent six band K.P method, spin polarization, two dimensional electron gas, two dimensional hole gas.



Shahrood University of Technology

**Faculty of physics
Solid State group**

**Theoretical investigation of Electronic, magnetic and Optical
properties of semiconductor nanostructures**

Mehdi Solaimani

**Supervisor(s):
Dr. Morteza Izadifard
Dr. Hadi Arabshahi**

**Advisor:
Dr. Mohammad Reza Sarkardei**

March 2013