بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۸ تا ۱۰ بهمن ماه۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز

خواص اپتیکی چاه‌های کوانتومی با جرم الکترون وابسته به مکان با روش تبدیل نقطه کانونی

سعیده آزادی[۱]، علیرضا کشاورز[۲] و ناصر زمانی[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم وتحقیقات فارس

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه صنعتی شیراز

چکیده – در این مقاله، خواص اپتیکی چاه کوانتومی $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ بررسی شده است. برای این منظور ابتدا با استفاده از روش انتقال نقطه کانونی و حل عددی معادله شرودینگر مقادیر ویژه انرژی و توابع موج را بدست می‌آوریم. سپس اثر جرم وابسته به مکان را بر روی ضریب جذب نوری و تغییرات ضریب شکست مطالعه می‌نماییم و نتایج را با جرم ثابت مقایسه می‌نماییم. نتایج نشان می‌دهند که وابستگی جرم الکترون به مکان نقش مهمی در بررسی خواص ایفا می‌کند.

کلید واژه- خواص اپتیکی، چاه کوانتومی، روش انتقال نقطه کانونی.

Optical properties of quantum wells with position-dependent mass with a point canonical transformation method

Saeedeh Azadi[1], Alireza Keshavarz[2] and Naser Zamani[2]

[1]Department of physics, Islamic Azad University Fars Science and Research Branch
[2] Department of physics, Faculty of Basic Sciences, Shiraz University of technology

Abstract-In this study, optical properties of quantum wells for typical $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ are investigated. For this purpose, by using the point canonical transformation method and numerical solution of the Schrödinger equation the energy levels and wave functions of electrons in the confinement potential are obtained. Then, the effect of position-dependent effective mass on the intersubband optical absorption coefficient and the refractive index change in the quantum well are studied. Our calculations were compared with the case is constant mass. Results show that the effect of the position-dependent mass plays important roles in studying the optical properties of semiconductor structures.

Keywords: Optical Properties, Quantum Wells, Point Canonical Transformation Method

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-05]

۱- مقدمه

امروزه مطالعه معادله شرودینگر وابسته به مکان به دلیل طیف وسیعی از کاربردهای آن در خواص اپتیکی و الکترونیکی نیمرساناها، چاه‌های کوانتومی، نقاط کوانتومی مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است[۳-۱]. هدف اصلی این مسئله پیدا کردن تراز های انرژی و توابع موج برای پتانسیل سیستم مورد مطالعه می‌باشد. بررسی ها در این زمینه نشان می‌دهند که تاکنون روش‌های زیادی از قبیل: مکانیک سیستم کوانتومی و پتانسیل جبری برای حل تحلیلی معادله موج بکار گرفته شده‌اند. به هر حال، این مدل‌ها نسبتاً پیچیده‌اند و برای همه ساختارهای فیزیکی کاربرد ندارند[۴و۵]. روش دیگر مورد استفاده برای مطالعه معادله موج وابسته به مکان، روش انتقال نقطه کانونی می‌باشد[۶]. این مدل با استفاده از یک روش ساده معادله شرودینگر وابسته به مکان را به معادله شرودینگر استاندارد با جرم ثابت تبدیل می‌کند.

در طی دو دهه اخیر، سیستم‌های کوانتومی شامل چاه‌های کوانتومی و نانوساختارها به دلیل خواص اپتیکی و الکترونیکی جدید مورد توجه قرار گرفته‌اند. خواص اپتیکی این ساختارها کاربردهای جالب توجهی در دستگاه‌های اپتوالکترونیکی نظیر: لیزر تقویت کننده مادون قرمز، آشکارسازهای نوری و تنظیم کننده های نوری از خود نشان می‌دهند. ضریب جذب خطی وغیر خطی و همچنین تغییرات ضریب شکست خطی و غیر خطی در میان خواص اپتیکی بیشتر مورد توجه محققان قرار گرفته‌اند[۷]. ما نیز در این مقاله قصد داریم این خواص را برای چاه‌های کوانتومی که جرم الکترون متغیر است بررسی نماییم که برای این منظور ابتدا با استفاده از روش انتقال نقطه کانونی معادله شرودینگر وابسته به مکان را به معادله شرودینگر با جرم ثابت تبدیل می‌کنیم در ادامه خواص اپتیکی را بررسی می‌نماییم.

۲- مبانی نظری

برای معرفی روش انتقال نقطه کانونی ابتدا معادله شرودینگر مستقل از زمان را برای پتانسیل $V(x)$ به‌صورت زیر در نظر می‌گیریم[۸و۹]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\frac{d\psi(x)}{dx}\right]+V_0(x)\psi(x)=E\psi(x) \qquad (۱)$$

با در نظر گرفتن انتقال $\psi(x)=m(x)^{1/4}\phi(y(x))$ و $y(x)=\int m(x)^{1/2}dx$، معادله موج (۱) را به فرم جدید زیر تبدیل می‌کند که اثر وابستگی جرم در پتانسیل جدید ظاهر می‌شود[۶و۹]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\phi(y)}{dy^2}+V_{eff}(y)\phi(y)=E\phi(y) \qquad (۲)$$

که در آن پتانسیل موثر مجموع از پتانسیل اولیه و شرایط اصلاح ناشی از وابستگی به محل جرم موثر است:

$$\begin{aligned}V_{eff}(y)&=V_0(y)+V_1(y)\\&=V_0(y)+\frac{\hbar^2}{32m_0}\left[\frac{5}{m(y)^2}\left(\frac{dm(y)}{dy}\right)^2-\frac{4}{m(y)}\frac{d^2m(y)}{dy^2}\right],\end{aligned} \qquad (۳)$$

بنابراین برای یک توزیع جرم $m(x)$، $y(x)$ را بدست می‌آوریم و بعد از آن x را بر حسب y حساب می‌کنیم. به این صورت بعد از محاسبه V_{eff} می‌توان معادله (۲) را به منظور پیدا کردن E و $\phi(y)$ حل نمود. تابع موج اصلی $\psi(x)$ و انرژی ویژه E به آسانی با معکوس انتقال بدست می‌آیند. در حقیقت با استفاده از این روش اثر جرم متغیر در پتانسیل موثر می‌باشد و معادله به معادله موج استاندارد تبدیل می‌شود. برای روشن‌تر شدن کاربرد روش انتقال نقطه کانونی در این مقاله به بررسی ۲ مثال خواهیم پرداخت

در این مقاله به بررسی اثر توزیع جرم افزایشی می‌پردازیم. فرض می‌کنیم که توزیع جرم در یک چاه کوانتومی محدود به صورت‌های زیر باشد.

۲-۱- توزیع جرم $m(x)=(a_1x+b_1)^2$

برای این توزیع جرم ثابت‌های a_1 و b_1 با استفاده از شرایط مرزی بدست می‌آیند و با اعمال انتقال نقطه کانونی داریم $m(y)=(2a_1y+b_1^2)$ و پتانسیل V_{eff} به صورت زیر منجر می‌شود:

$$V_{eff}(y)=\frac{\hbar^2}{32m_0}\left(\frac{20a_1^2}{(b_1^2+2ya_1)^2}\right) \qquad (۴)$$

۲-۲- توزیع جرم $m(x)=(a_2x+b_2)^4$

همانند توزیع جرم قبلی ابتدا $y(x)$ را بدست می‌آوریم و بعد از آن تابع جرم را برحسب y بیان می‌کنیم که به

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-05]

صورت $m(y)=(3a_2y+b_2^3)^{(4/3)}$ و در پایان پتانسیل موثر به صورت زیر داده می‌شود:

$$V_{eff}(y)=\frac{\hbar^2}{32m_0}\left(\frac{64a_2^2}{(b_2^3+3ya_2)^2}\right). \quad (۵)$$

با توجه به اینکه برای معادله شرودینگر با پتانسیل‌های ارائه شده در (۴)و (۵) حل تحلیلی وجود ندارد، روش‌های عددی مورد نیاز است که برای این منظور از روش رانگ کوتا مرتبه ۴ استفاده شده است.

۳- خواص اپتیکی

بعد از محاسبه مقادیر ویژه انرژی و توابع موج وابسته، تغییرات ضریب شکست خطی و غیرخطی و همچنین ضریب جذب خطی و غیرخطی را برای گذارهای نوری بین باندی از روش ماتریس چگالی استفاده شده است تغییرات ضریب شکست خطی و غیرخطی به صورت زیر داده می‌شوند[۱۰و۱۱]:

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r}=\frac{\sigma_v|M_{21}|^2}{2n_r^2\varepsilon_0}\left[\frac{E_{21}-\hbar\omega}{(E_{21}-\hbar\omega)^2+(\hbar\Gamma_{12})^2}\right] \quad (۷)$$

$$\frac{\Delta^{(3)}n(\omega)}{n_r}=\frac{-\sigma_v}{4n_r^3\varepsilon_0}\times\frac{|M_{21}|^2\mu cI}{\left[(E_{21}-\hbar\omega)^2+(\hbar\Gamma_{21})^2\right]^2}$$
$$\left[4(E_{21}-\hbar\omega)|M_{21}|^2-\frac{(M_{22}-M_{11})^2}{E_{21}^2+(\hbar\Gamma_{21})^2}\right. \quad (۸)$$
$$\left\{(E_{21}-\hbar\omega)\left[E_{21}(E_{21}-\hbar\omega)-(\hbar\Gamma_{21})^2\right]\right.$$
$$\left.\left.-(\hbar\Gamma_{21})^2(2E_{21}-\hbar\omega)\right\}\right]$$

تغییرات ضریب جذب خطی و غیر خطی نیز به صورت زیر بدست می‌آیند:

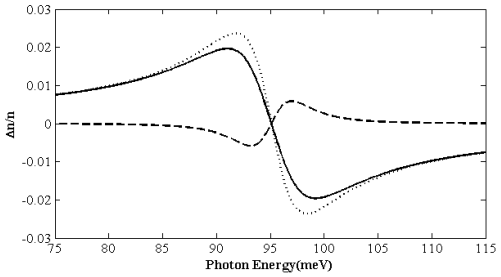
$$\alpha^{(1)}(\omega)=\omega\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_R}}|\mu_{21}|^2\frac{\sigma_v\hbar\Gamma_{21}}{(E_{21}-\hbar\omega)^2+(\hbar\Gamma_{12})^2} \quad (۹)$$

$$\alpha^{(3)}(\omega)=-\omega\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_R}}\frac{I}{2n_r\varepsilon_0c}\left\{\frac{\sigma_v|\mu_{21}|^2\hbar\Gamma_{21}}{\left[(E_{21}-\hbar\omega)^2+(\hbar\Gamma_{21})^2\right]^2}\right.$$
$$\left(4|\mu_{21}|^2-\frac{|\mu_{11}-\mu_{22}|}{(\hbar\omega)^2+(\hbar\Gamma_{22})^2}\right. \quad (۱۰)$$
$$\left.\left.-\frac{\left\{(E_{21}-\hbar\omega)^2-(\hbar\Gamma_{21})^2+2E_{21}(E_{21}-\hbar\omega)\right\}}{(\hbar\omega)^2+(\hbar\Gamma_{22})^2}\right)\right\}$$

تغییرات ضریب جذب وضریب شکست کل مجموع بخش خطی و غیر خطی است.

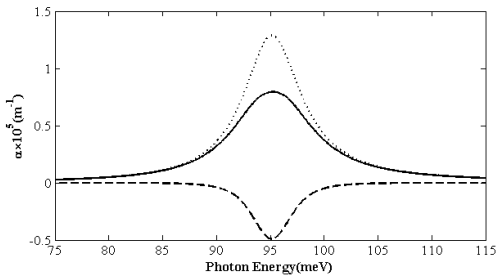
σ_v چگالی حامل‌ها، $E_{21}=E_2-E_1$ اختلاف انرژی بین دو تراز اول سیستم، n_r ضریب شکست محیط، $M_{ij}=\left|\langle\psi_i|qx|\psi_j\rangle\right|(i,j=1,2)$ المان های ماتریس گشتاور دوقطبی بر بار الکترون می‌باشند، c سرعت نور در فضای آزاد می‌باشد و $I=2\varepsilon_0n_rc|E|^2$ شدت میدان الکترومغناطیسی می‌باشد.

پارامترهای مورد استفاده برای نیمرسانای چاه کوانتومی نوع $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ به صورت زیر می باشند[۷و۹]:
$\Gamma_{21}=1/T_{21}$ ، $m_{AlGaAs}=0.0919m_0$ ،$n_r=3.2$ که $\mu=4\pi\times10^{-7}$ ،$\sigma_v=3.0\times10^{22}m^{-3}$ ،$T_{21}=.02ps$ $I=0.3\times10^{10}W/M$ و $V_0=228meV$ (متناظر با غلظت $x=0.3$ از آلومینیوم). در شکل (۱) تغییرات ضریب شکست خطی و غیر خطی و کل برای $m(x)=(a_2x+b_2)^2$ بر حسب انرژی فوتون فرودی ترسیم شده است.



شکل ۱: ضریب شکست خطی(منحنی نقطه چین)، ضریب شکست غیر خطی (منحنی خط چین)و ضریب شکست کل (منحنی توپر) برای $m(x)=(a_2x+b_2)^2$.

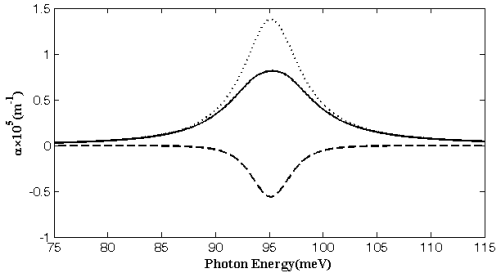
شکل (۲) تغییرات ضریب جذب خطی و غیر خطی و کل را برای مدل $m(x)=(a_1x+b_1)^2$ بر حسب انرژی فوتون فرودی نشان می‌دهد. مشاهده می‌شودکه ضریب جذب دارای یک پیک می‌باشد که در انرژی متناظر با اختلاف دو تراز رخ می‌دهد.



[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-05]

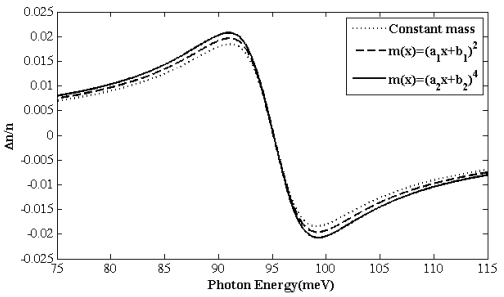
شکل ۲: ضریب جذب خطی(منحنی نقطه چین)، ضریب جذب غیر خطی (منحنی خط چین)و ضریب جذب کل (منحنی توپر) برای $m(x)=(a_2x+b_2)^2$.

شکل (۳) تغییرات ضریب جذب را برای توزیع جرم وابسته به مکان $m(x)=(a_2x+b_2)^4$ بر حسب انرژی فوتون فرودی نشان داده شده‌اند.

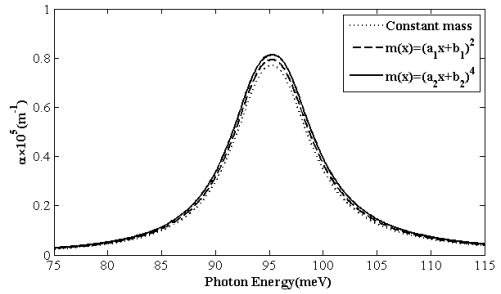


شکل ۳: ضریب جذب خطی(منحنی نقطه چین)، ضریب جذب غیر خطی (منحنی خط چین)و ضریب جذب کل (منحنی توپر) برای $m(x)=(a_2x+b_2)^4$.

به منظور مقایسه اثر جرم وابسته به مکان و جرم ثابت بر روی ضریب شکست کل و ضریب جذب کل در شکل (۴)و (۵) این کمیت‌ها برحسب تابع انرژی فوتون برای جرم ثابت و جرم وابسته به مکان برای دو توزیع ارائه شده ترسیم شده است.



شکل ۴: تغییرات ضریب شکست کل برای جرم ثابت و دو مدل فرضی برای وابستگی جرم به مکان.



شکل ۵: تغییرات ضریب جذب کل برای جرم ثابت و دو مدل فرضی برای وابستگی جرم به مکان.

همانطور که از شکل (۴) و (۵) مشاهده می‌شود در دو مدلی که جرم الکترون وابسته به مکان می‌باشد تغییرات ضریب شکست بیشتر و پیک ضریب جذب نیز دارای افزایش است.

۴- نتیجه گیری

در این مقاله، با استفاده از روش انتقال نقطه کانونی معادله شرودینگر وابسته به مکان را به معادله شرودینگر استاندارد با جرم ثابت تبدیل می‌شود که اثر تغییر جرم وابسته به مکان در پتانسیل موثر ظاهر می‌شود. بعد از بدست آوردن توابع موج و مقادیر ویژه انرژی مربوط به معادله شرودینگر در چاه کوانتومی به بررسی خواص اپتیکی آن پرداخته شده است. در پایان تغییرات ضریب جذب و تغییرات ضریب شکست را برای دو توزیع جرم افزایشی بدست می‌آوریم، نتایج نشان می‌دهند که اثر جرم افزایشی وابسته به مکان دربررسی خواص اپتیکی تأثیر دارد و پیک ضریب جذب بیشتر می‌شود.

مراجع

[1] Bastard G., *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Physics Today 45 (1992) 103.

[2] Alexandre Schmidt G.M., *Wave-packet revival for the Schrodinger equation with position-dependent mass*, **Phys. Lett. A**, 353 (2006) 459-462.

[3] Harrison P., *Quantum Wells, Wires and Dots*, P.89, New York, John Willey& Sons 2005.

[4] Cooper F., Khare A., Sukhatme U., *Supersymmetry in Quantum Mechanics*, **Phys. Rep.** 251 (1995) 267-385.

[5] Wybourne B.G., *Classical Groups for Physicists*, New York, Wiley Interscience, 1974.

[6] BenDaniel D. J., Duke C. B., *Space-Charge Effects on Electron Tunneling*, **Phys. Rev. B**, 152 (1996) 683-684.

[7] Ünlü S., Karabulut I., Safak H., *Linear and nonlinear intersubband optical absorption coefficients and refractive index changes in a quantum box with finite confining potential*, **Physica E**, 33 (2006) 319-324.

[8] Jiang Yu., Shi-Hai Dong, *Exactly solvable potentials for the Schrodinger equation with spatially dependent mass*, **Phys. Lett. A**, 325 (2004) 194-198.

[9] Keshavarz, A., N. Zamani. *Optical Properties of Modified Poschl-Teller Quantum Well with Position-Dependent Mass*." **J. Comput. Theor. Nanosci.** 10, (2013) 2155-2160.

[10] Rosencher E., Bois P., *Model system for optical nonlinearities: Asymmetric quantum wells*, **Phys. Rev. B**, 44 (1991) 11315-11315.

[11] Ahn D., Chuang S.L., *Calculation of linear and nonlinear intersubband optical absorptions in a quantum well model with an applied electric field*, **IEEE J. Quant. Electron.** 23, (1987) 2196-2204.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-05]