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

تحلیل خواص نوری نقطه کوانتومی هرمی شکل InAs/GaAs به روش تنگ بست تعمیم داده شده Hückel

ستاره صداقت، مسعود برهمن، محمد حسین شیخی و عباس ظریفکار

دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر، دانشگاه شیراز، شیراز

چکیده – ساختار نقطه کوانتوم به دلیل محدودیت سه بعدی، قابلیت گذار درون باندی در طول موج های مادون قرمز را داراست. به همین منظور در این مقاله به بررسی رفتار نوری نقطه کوانتوم InAs هرمی شکل با اندازه های متفاوت پرداخته شده است. در این راستا، ابتدا رفتار الکترونیکی ساختار با روش EHT محاسبه شده و با استفاده از توابع موج به دست آمده و روش Kubo- Greenwood ضریب جذب محاسبه می شود. با مقایسه نتایج مشاهده می شود که با افزایش اندازه ساختار نقطه کوانتومی ، انرژی و میزان جذب کاهش می یابد.

کلید واژه- تنگ بست تعمیم داده شده Hückel، ضریب جذب نوری، نقطه کوانتومی InAs/GaAs.

Analysis of the Optical Properties of Self-Assembled Pyramidal InAs/GaAs Quantum Dot Using the Extended Hückel Tight-Binding Method

Setareh Sedaghat, Masoud Berahman, Mohammad Hossein Sheikhi, and Abbas Zarifkar

School of Electrical and Computer Engineering, Shiraz University, Shiraz

Abstract- Quantum-dot (QD) structures have the capability of the infrared intraband transitions because of their 3-dimensional confinement. In this paper, a self-assembled pyramidal InAs/GaAs QD is considered and the effects of the quantum dot geometry, such as the dot height and aspect ratio on the intraband transitions are theoretically studied by EHT formalism. The results show that QD size increase leads to considerable reduction of the beam absorption.

Keywords: Extended Hückel Tight-Binding, InAs/GaAs Quantum-Dot, Optical absorption coefficient.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-01]

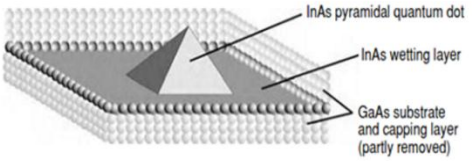
۱-مقدمه

ساختارهای نقطه کوانتومی InAs رشد یافته با روش خود انباشتگی (self assembled) طی چندین دهه اخیر به دلیل داشتن مزایایی از جمله حساسیت ذاتی به نورهای تابشی عمودی، کاهش پراکندگی الکترون-فونون، ترازهای برانگیخته با زمان پایداری بیشتر، جریان تاریک کمتر و دمای عملکرد بالاتر مورد بررسی قرار گرفته اند[۱]. این مزایا در نقطه کوانتومی موجبات آشکارسازی نور مادون قرمز را فراهم کرده است[۲]. رفتار جذبی این نقاط کوانتومی در طول موج عملکردی و میزان حساسیت آشکارسازهای نوری مادون قرمز بسیار مهم است. پژوهش های نظری پیشین در زمینه بررسی خاصیت نوری نقطه کوانتومی را به دودسته می توان تقسیم نمود: ۱- روش زنجیره وار (continuum) ۲- روش مبتنی بر مدلسازی اتمی. در روش های مدلسازی اتمی هم چون ab initio و نظریه تابعی چگالی می توان دقت مورد نظر در محاسبه باند انرژی ساختار را به دست آورد ولی به دلیل حجم بالای محاسبات که بر مبنای اندازه واقعی سیستم (چند میلیون اتم) انجام می شود، مقرون به صرفه نمی باشد[۳-۴]. در نتیجه برای داشتن دقت مناسب و عدم نیاز به محاسبات سنگین در بررسی رفتار الکترونیکی و نوری ادوات نانویی از روش تجربی تنگ بست استفاده شده است. در روش تجربی تنگ بست متعامد (OTB)، اوربیتال های سایت های مختلف (مجموعه پایه) را نسبت به هم متعامد فرض می کنند. از این روش برای ساختارهای به خصوصی می توان استفاده کرد. از آنجا که تابع موج اتمی متعامد نیست، در نتیجه مجموعه پایه های OTB نمی تواند به درستی حالت های ویژه همیلتونی اتمی را بیان کند. بنابراین، برای تحلیل سیستم در مرز بین دو لایه با جنس های متفاوت مناسب نیست[۵]. از اینرو، با توجه به این که نقطه کوانتوم InAs با زیر لایه GaAs دارای اختلاف ثابت شبکه ۷٪ می باشد، بهتر است از روش شبه تجربی تنگ بست با مجموعه پایه های غیر متعامد استفاده شود. این روش را nonorthogonal Tight-Binding می‌نامند. زیلینسکی و همکارانش در سال ۲۰۱۰، بررسی رفتار الکترونیکی و نوری ساختار لنزی شکل نقطه کوانتومی رشد یافته به روش خود انباشتگی را با محاسبه ماتریس همیلتونی با روش تنگ بست متعامد و پارامترهای Slater-Koster انجام داده اند[۴].

در این مقاله برای اولین بار، رفتار الکترونیکی نقطه کوانتوم InAs هرمی شکل رشد یافته بر روی زیر لایه GaAs را با روش شبه تجربی غیر متعامد Extended Hückel Tight-Binding(EHT) برای اوربیتال های sp^3s^* و با استفاده از پارامترهای برازش GW (Greenwood) برای نیمه هادی GaAs و InAs مورد بررسی قرار داده شده است. رفتار نوری این ساختار نیز با روش Kubo-Greenwood مطالعه شده است. هم چنین تغییر اندازه نقطه کوانتومی در رفتار نوری ساختار مورد بررسی قرار گرفته است. در ادامه، دربخش ۲، به معرفی هندسه ساختار می پردازیم. سپس در بخش ۳ مبانی نظری کار ارائه شده و مبتنی بر آن، نتایج تحلیل و بحث های مربوط در بخش ۴ بیان می شود و جمعبندی نیز در بخش ۵ ارائه خواهد گردید.

۲- هندسه‌ی ساختار

در شکل ۱، ساختار یک نقطه کوانتمی هرمی نشان داده شده است. در رشد ساختار نقطه کوانتومی InAs با روش Stranski–Krastanov، عدم انطباق در ثابت شبکه دو نوع ماده GaAs و InAs موجب ایجاد کشش بین دو لایه با جنس‌های مختلف می‌شود. چند لایه ابتدایی InAs یک لایه‌ی دو بعدی به نام لایه wetting ایجاد می‌کنند. اگر لایه نشانی ادامه یابد، نشاندن InAs در دو بعد خود به خود به صورت سه بعدی و حالت جزیره بر روی زیر لایه GaAs در می‌آید[۶]. جزایر به وجود آمده هرمی شکل در نظر گرفته شده و از آنجایی که زیر لایه GaAs در جهت (۱۰۰) رشد داده شده است برای انطباق بهتر بین لایه‌ها، InAs نیز در همان جهت رشد داده می شود. هم چنین، اتم های In، As و Ga در سایت اتمی ساختار بلوری زینک-بِلند GaAs قرار دارند و ابعاد GaAs احاطه کننده، محدوده محاسباتی را تعیین می‌کند.



شکل ۱: ساختار نقطه کوانتوم InAs هرمی شکل[۷].

۳- مبانی نظری تحلیل

در این بخش، روش های نظری بررسی رفتار الکترونیکی و نوری سیستم نقطه کوانتومی توضیح داده می شود. برای بررسی رفتار الکترونیکی سیستم از روش EHT استفاده می شود. در این روش، ساختار الکترونیکی نقطه کوانتومی توسط مجموعه پایه های اوربیتال های اتمی محلی بسط داده می شود(LCAO):

$$\phi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\hat{r}) \qquad (۱)$$

که Y_{lm} هارمونیک کروی بوده و R_{nl} جمع آثار اوربیتال های Slater می باشد.

$$R_{nl}(r) = \frac{r^{n-1-l}}{(2n)!}C_1(2\eta_1)^{2n+1}e^{-\eta_1 r} + \frac{r^{n-1-l}}{(2n)!}C_2(2\eta_2)^{2n+1}e^{-\eta_2 r} \qquad (۲)$$

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-01]

اوربیتال های اتمی محلی توسط پارامترهای η_1، η_2، C_1 و C_2 بیان می شوند که این پارامترهای برای اوربیتال های والانس هر اتم از سیستم یا هر نوع نیمه هادی تعریف شده است.

همیلتونی یک الکترون خواهد بود:

$$H_{ij} = \begin{cases} E_i + \delta V_H(R_i) \\ \frac{1}{4}(\beta_i + \beta_j)(E_i + E_j)S_{ij} + \frac{1}{2}(\delta V_H(R_i) + \delta V_H(R_j))S_{ij} \end{cases} \quad (۴)$$

که در آن E_i انرژی اوربیتال i، S_{ij} درایه ماتریس همپوشانی و β_i پارامتر برازش Hückel بوده که معمولاً ۱/۷۵ اختیار می شود[۷]. $\delta V_H(R_i)$ پتانسیل هارتلی است که اثر الکترون های دیگر در سیستم بر تابع موج تک الکترون مورد نظر را نشان می دهد. این پتانسیل در مدل استاندارد Hückel لحاظ نشده و با حل معادله پواسون می توان آن را به دست آورد[۷]. با داشتن درایه های ماتریس همیلتونی و همپوشانی می توان با حل معادله مشخصه ، مقادیر ویژه و حالت های ویژه انرژی را به دست آورد. برای بررسی طیف جذبی بایستی ضریب جذب را محاسبه کرد. به همین منظور، ابتدا با استفاده از روش Kubo-Greenwood تانسور پذیرفتاری را محاسبه کرده و با دانستن معادله (۶) که نشان دهنده ارتباط گذردهی نسبی با تانسور پذیرفتاری است، گذردهی نسبی به دست می آید.

$$\chi_{ij}(\omega) = -\frac{e^2\hbar^4}{m^2\varepsilon_0 V\,\omega^2}\sum_{nm}\frac{f(E_m) - f(E_n)}{E_{nm} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma}\pi^i_{nm}\pi^j_{mn} \quad (۵)$$

π^i_{nm} مؤلفه i ام ماتریس اندازه حرکت (ممنتم) که همان ماتریس مشتق همیلتونی است بین دو حالت n و m می باشد. V حجم، Γ پارامتر پهن شدگی و f تابع فرمی است.

$$\varepsilon_r(\omega) = (1 + \chi(\omega)) \quad (۶)$$

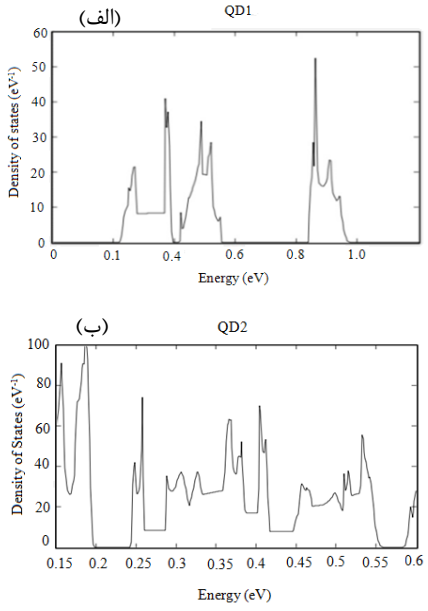
$\sqrt{\varepsilon_r}$ مقداری مختلط بوده که قسمت موهومی آن؛ یعنی، ضریب extinction با ضریب جذب با رابطه زیر در ارتباط است:

$$\mathrm{Im}(\sqrt{\varepsilon_r}) \equiv \kappa = \frac{\sqrt{(\mathrm{Re}(\varepsilon_r))^2 + (\mathrm{Im}(\varepsilon_r))^2} - \mathrm{Re}(\varepsilon_r)}{2} \quad (۷)$$

$$\alpha_a = 2\frac{\omega}{c}\kappa$$

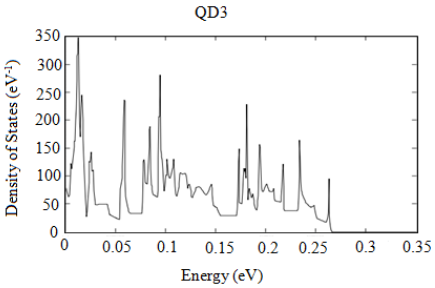
۴- نتایج تحلیل و بحث

نقطه کوانتوم های مدل شده در این مقاله به صورت نقطه کوانتوم های جفت نشده و هرمی شکل به روش خود انباشتگی InAs/GaAs مورد بررسی قرار گرفته اند. سه نقطه کوانتوم مورد مطالعه دارای ابعاد و تعداد اتم های معینی که در ذیل به آن ها اشاره شده است، می باشند. لازم به ذکر است که قطبیدگی نور ورودی به صورت درون صفحه ای در نظر گرفته شده است. نقطه کوانتوم ۱، دارای سطح مقطعی با ابعاد (A°^{2}) ۷/۵۴×۴/۲۷ و ارتفاع ۴/۲۷ A° می باشد که ۵۴ اتم در بررسی رفتار چنین نقطه کوانتومی مؤثرند. نقطه کوانتوم ۲، دارای سطح مقطعی با ابعاد (A°^{2}) ۸/۵۳۶۲×۱۰/۵۶ و ارتفاع ۴/۲۹ A° بوده که ۱۹۰ اتم را شامل می شود و نقطه کوانتوم ۳، دارای سطح مقطعی با ابعاد (A°^{2}) ۱۳/۵۸×۱۲/۸۰۴ و ارتفاع ۶/۴۰۲ A° می باشد و شامل ۴۲۶ اتم می باشد. در ادامه چگالی حالت ها (DOS) این سه نقطه کوانتومی و در نهایت ضریب جذب آن ها بررسی می شود. در شکل ۲، چگالی حالت های نقاط کوانتمی نشان داده شده است.



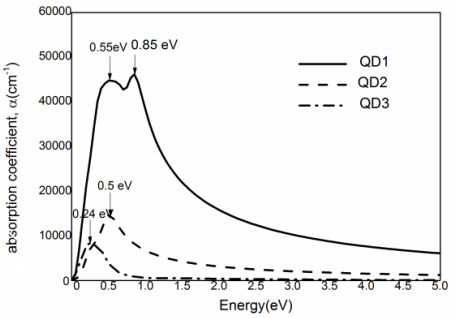
(ج)

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-01]



شکل ۲: چگالی حالت نقطه کوانتومی: الف) نقطه کوانتومی۱. ب) نقطه کوانتومی۲. ج) نقطه کوانتومی۳.

در شکل ۳ ضریب جذب محاسبه شده برای سه اندازه مختلف نقطه کوانتوم آورده شده است. در هر حالت پارامتر پهن شدگی (Γ) ۲۰ meV در نظر گرفته شده است. با توجه به شکل۳، ضریب جذب این نقطه کوانتوم های ۱،۲ و ۳ به ترتیب (cm^{-1}) ۴۵۹۶۶، (cm^{-1}) ۱۴۶۶و (cm^{-1}) ۸۱۵۱/۳ می باشد.



شکل ۳: ضریب جذب نقطه کوانتوم.

نقطه کوانتومی ۳ سطح مقطع و ارتفاع بیشتری نسبت به دو ساختار دیگر دارد. در مورد ارتباط سطح مقطع و ضریب جذب نقطه کوانتومی با توجه به شکل ۳، می توان گفت که با افزایش سطح مقطع ضریب جذب کاهش می یابد. این کاهش از فشردگی کوانتومی ضعیف تر حامل ها در نقطه کوانتوم با سطح مقطع بیشتر ناشی می شود. ازآنجایی که نسبت ابعاد نیز با افزایش اندازه نقطه کوانتوم زیاد شده است این گونه به نظر می رسد که نقطه کوانتوم صاف تر شده و رفتاری نزدیکتر به چاه کوانتومی دارد. تحدید کوانتومی ضعیف منجر به کاهش فاصله الکترون–حفره در سه بعد شده و در نتیجه گاف انرژی مؤثر اکسایتن کاهش یافته و متعاقباً جابه جایی به انرژی پایین تر در طیف جذب مشاهده می شود[۹-۸]. از طرفی، در نقطه کوانتوم هایی با ارتفاع بیشتر فاصله حالت های گذار درون باندی کاهش یافته در نتیجه انرژی گذار کاهش می یابد[۱۰]. یکی از دلایل کاهش ضریب جذب در نقطه کوانتوم هایی با سطح مقطع و ارتفاع بیشتر می تواند کاهش چگالی حالت مربوط به انرژی گذار باشد؛ البته ممکن است چگالی حالت افزایش یابد ولی احتمال توزیع حامل ها نیز خود یک فاکتور مهم به حساب می آید. در نتیجه، در مجموع با افزایش اندازه نقطه کوانتومی ضریب جذب کاهش می یابد.

۵- نتیجه گیری

در این مقاله ابتدا رفتار الکترونیکی نقطه کوانتوم InAs هرمی شکل با روش EHT به دست آمد و با فرمول kubo- Greenwood و با داشتن حالت های ویژه انرژی به دست آمده از EHT ضریب جذب در قطبیدگی درون صفحه ای محاسبه گردید. این روند برای سه نقطه کوانتوم با اندازه ها و نسبت ابعاد مختلف انجام شد. در این محاسبات مشاهده شد که با افزایش ابعاد نقطه کوانتوم، انرژی گذار به دلیل کاهش فاصله ترازهای انرژی درون باندی کاهش یافته است. هم چنین کاهش ضریب جذب نیز به دلیل کاهش DOS در نقطه کوانتوم با ابعاد بزرگتر مشاهده می شود.

مراجع

[1] Chakrabarti, S., Stiff-Roberts, A. D., Su, X. U., Bhattacharya, P., Ariyawansa, G., and Perera, A. G. U., *High-performance mid-infrared quantum dot infrared photodetectors*, J. Phys. D: Appl. Phys., Vol. 38,: 2135- 2141 , 2005.

[2] Chen, Z., Baklenov, O., Kim, E. T., Mukhametzhanov, I., Tie, J., Madhukar A., Ye, Z., and Campbell, J. C., *Normal incidence InAs/AlxGa1-xAs quantum dot infrared photodetectors with undoped active region*, J. Appl. Phys.,Vol. 89,: 4558- 4563, 2001.

[3] Zielinski, M., *Including strain in atomistic tight-binding Hamiltonians: An application to self-assembled InAs/GaAs and InAs/InP quantum dots*, Phys. Rev. B, Vol. 86, 115424: 1- 9, 2012.

[4] Zieliński, M., Korkusiński, M., and Hawrylak, P., *Atomistic tight-binding theory of multiexciton complexes in a self-assembled InAs quantum dot*, , Phys. Rev. B, Vol. 81, 085301: 1-12, 2010.

[5] Kienle, D., Cerda, J. I., and Ghosh, A. W., *Extended Hückel theory for band structure, chemistry, and transport. I. Carbon nanotubes*, J. Appl. Phys.,Vol. 100, 043714: 1- 9, 2006.

[6] Novotny, L., and Hecht, B.,*Principles of Nano-Optics*, p.310, Cambridge University Press, 2006.

[7] Stokbro, K., Petersen, D. E., Smidstrup, S., Blom, A., and Ipsen, M., *Semi-Empirical Model for Nano-Scale Device Simulations*, Phys. Rev. B, Vol. 82, 075420, 2010.

[8] Baskoutas, S., Terzis, A. F., *Size-dependent bandgap of colloidal quantum dots*, J. Appl. Phys., Vol. 99, 013708 : 1-3, 2006.

[9] Karabulut, I., Baskoutas, S., *Linear and nonlinear optical absorption coefficients and refractive index changes in spherical quantum dots: Effects of impurities, electric field, size, and optical intensity*, J. Appl. Phys., Vol. 103, 073512: 1- 5, 2008.

[10] Prodanovic´, N., Vukmirovic´, N., Indjin, D., Ikonic´, Z., and Harrison, P., *Electronic states and intraband terahertz optical transitions in InGaAs quantum rods*, J. Appl. Phys., Vol. 111, 073110: 1- 6, 2012.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-01]