

تنزل بین زیرباند در چاه های کوانتومی باند هدایت

علی افزلی کوشا
استادیار

سیدمحمدجواد اخوت علویان
کارشناس ارشد

محمود کمره ای
دانشیار

گروه مهندسی برق و کامپیوتر، دانشکده فنی، دانشگاه تهران

چکیده

از تنزل حامل های بار بین زیرباندهای مختلف یک چاه کوانتومی، می توان برای دستیابی به عملکرد لیزری استفاده نمود. به ویژه گسیل لیزری در محدوده مادون قرمز شدید (تراهرتز) طیف الکترومغناطیسی که با استفاده از نیمه هادی های بدنه ای قابل حصول نیست، یکی از موارد مهم کاربرد این گذرهاست. بنابر این، ابتدا انگیزه اصلی مطالعه این تنزل ها تشریح شده است. آنگاه، چهار چوب تئوری مورد استفاده برای محاسبه نرخ تنزل بیان گردیده است. در این قسمت، ضمن معرفی قانون طلایی فرمی، چاه های پتانسیل از نظر کوانتومی بررسی شده و توابع موج و انرژی های مجاز برای ذره موجود در آنها بدست آمده است. سپس تنزل بین زیرباند در چاه های کوانتومی مربعی، مثلثی و پله ای GaAs مطالعه شده و نتایج بدست آمده، از نظر فیزیکی توجیه شده اند. همچنین، تنزل حامل ها در یک چاه کوانتومی پله ای نامتقارن GaAs با هدف دستیابی به عملکرد لیزری بررسی شده است.

Intersubband Transitions in Conduction-Band Quantum Wells

S. M. J. Okhovat-Alavian
M. Sc Student

A. Afzali-Kusha
Assistant Professor

M. Kamarei
Associate Professor

Department of Electrical and Computer Engineering,
University of Tehran

Abstract

The relaxations of charge carriers between different subbands of a quantum well can be used to achieve laser action. Especially, laser radiation in far-infrared of electromagnetic spectrum, which can not be achieved by bulk semiconductors, is one of the most important applications of these transitions. Therefore, the motivation of this study is first explained. Then, the theoretical framework for the relaxation rate calculations is developed. In this part, after introducing the Fermi Golden Rule, the quantum wells are studied using the quantum mechanics relations and the wave functions and energy levels for the present particle are calculated. Then, intersubband transitions in GaAs square, triangular and step quantum wells are studied and the results are physically interpreted. Finally, the relaxation of carriers in an asymmetric Ga-As quantum well with the purpose of achieving the laser action is investigated.

مطالعه گذرهای بین زیرباند در چاه های کوانتومی موضوعی است که عمدتاً به دلیل کاربرد آن در ساخت لیزرهای مادون قرمز شدید مورد توجه قرار دارد.

در یک لیزر، تنزل حامل های بار از یک موقعیت انرژی بالا به یک موقعیت انرژی پایین، که توسط فوتون ها القا می شود، موجب تولید یک تابش هم دوس تک فرکانس می گردد. هر سیستم کوانتومی که دارای موقعیت های انرژی گسسته باشد، می تواند به منظور عملکرد لیزری مورد توجه باشد. نیمه هادی ها با توجه به تکنولوژی ساخت آسان و متداول آنها، یکی از بهترین انتخاب ها هستند. در این مواد از باند هدایت به عنوان موقعیت انرژی بالا و از باند ظرفیت به عنوان موقعیت انرژی پایین استفاده می شود و به این ترتیب، انرژی هر فوتون تابش گسیل یافته و در نتیجه فرکانس تابش لیزری توسط باند ممنوع نیمه هادی تعیین می گردد. برای تولید گسیل لیزری در محدوده مادون قرمز شدید طیف الکترومغناطیسی، که کاربردهای فراوانی در طیف نمایی، نجوم رادیویی، مخابرات فضایی و حسگرها دارد، به اختلاف انرژی هایی در سطح چند ده میلی الکترون ولت نیاز است. اگرچه با نیمه هادی های مرکب II-VI می توان به باند ممنوع در همین حد انرژی دست یافت [۱]، اما به دلیل متداول نبودن تکنولوژی ساخت، ناهمگن بودن کریستال رشد یافته [۲] و حساسیت حرارتی زیاد فرکانس لیزر ساخته شده از این مواد [۳]، تاکنون دستیابی به عملکرد لیزری در محدوده مادون قرمز شدید تنها با منابع گازی امکان پذیر بوده است. در چاه های کوانتومی، به دلیل محدود بودن حرکت حامل ها در یک بعد (z)، هر یک از باندهای انرژی هدایت و ظرفیت به زیرباندهایی تبدیل می شوند که فاصله انرژی آنها بستگی به عرض و شکل چاه دارد. در این ساختارها، اختلاف انرژی لازم برای دستیابی به طول موج های مادون قرمز قابل حصول است. برای بررسی امکان سنجی ساخت لیزر، مطالعه گذر بین زیرباند ضروری می باشد.

۲ - چهارچوب تئوری الف) پراکندگی

در یک سیستم کوانتومی که با یک همیلتونین مستقل از زمان توصیف شده است، حالت کوانتومی ذرات با گذشت زمان تغییر نمی کند. اما اگر در این سیستم

اختلال هایی (پدیده های پراکندگی) نیز وجود داشته باشد، این اختلال ها قادر خواهند بود ذرات را از یک حالت به حالت کوانتومی دیگر منتقل نمایند.

یک پدیده پراکندگی، با یک همیلتونین $H_s(\mathbf{r}, t)$ و یا در حالت ساده تر با یک تابع انرژی پتانسیل $U_s(\mathbf{r}, t)$ تعریف می شود. برای پراکندگی های هارمونیک که با همیلتونین [۴ و ۵]:

$$H_s(\mathbf{r}, t) = H_s(\mathbf{r}) e^{i\omega t} \quad (1)$$

معرفی می شوند، نرخ پراکندگی ذرات از حالت کوانتومی k به k' ، با قانون طلایی فرمی داده می شود [۴ و ۵]:

$$S(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{kk'}|^2 \delta(E(k') - E(k) + \hbar\omega) \quad (2)$$

که در آن $E(k)$ ساختار باند سیستم و:

$$H_{kk'} = \int_{\Omega} \psi_{k'}^*(\mathbf{r}) H_s(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3)$$

المان ماتریسی همیلتونین مستقل از زمان پراکندگی است.

در رابطه (۳)، $\psi_k(\mathbf{r})$ و $\psi_{k'}(\mathbf{r})$ توابع موج مستقل از زمان ذره در حالت های اولیه نهایی k و k' هستند و Ω حجم کل سیستم می باشد. در رابطه (۲)، تابع دلتا بیانگر بقای انرژی است. در برهم کنش پدیده پراکننده و ذره، ممکن است انرژی ذره افزایش یا کاهش یابد. این اختلاف انرژی، با انرژی $\hbar\omega$ پدیده پراکننده برابر می باشد. علامت (-) جذب انرژی و (+) گسیل انرژی را بیان می دارد.

مکانیزم های پراکندگی که در جامدات کریستالی با آنها مواجه هستیم همگی از نوع هارمونیک می باشند و بنابراین این با استفاده از قانون طلایی فرمی، خواهیم توانست نرخ پراکندگی بین هر دو حالت کوانتومی را بیابیم.

ب) توابع موج و انرژی های مجاز چاه های کوانتومی

در یک ساختار کریستالی بدنه ای، تابع انرژی پتانسیل حاکم بر ذره یک تابع متناوب سه بعدی با دوره تناوب شبکه کریستالی است. در ساختارهای کریستالی چاه کوانتومی، که حرکت حامل ها در جهت z محدود

که توابع $f_n(z)$ و مقادیر ویژه انرژی E_n در معادله:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} f_n(z) + U(z) f_n(z) = E_n f_n(z) \quad (9)$$

صدق می‌کنند. عدد کوانتومی گسسته n به همراه بردار موج صفحه‌ای k_p حالت کوانتومی ذره را مشخص می‌کنند. باتوجه به گسسته بودن مقادیر E_n ، رابطه (۸) - (ب) بیان می‌دارد که ساختار باند به صورت زیرباند‌هایی است که هر یک از آنها متناظر با یک مقدار n می‌باشد. برای چاه‌های کوانتومی باند هدایت که مورد مطالعه ما هستند، وابستگی $E(k_p)$ به بردار موج k_p ، سهمی فرض می‌شود:

$$E(k_p) = \frac{\hbar^2 k_p^2}{2m^*} \quad (10)$$

در مقایسه با توابع بلاخ سه بعدی $(e^{ik \cdot r} u_k(r))$ ، سلول مرکزی $u_{k_p}(\rho)$ در چاه‌های کوانتومی، یک تابع دو متغیره است و در ضمن $e^{ik_z z}$ نیز با تابع پوش $f_n(z)$ ، که تابع شکل چاه است، جایگزین شده است. عدد کوانتومی گسسته n ، که از محدودیت حرکت ذرات در جهت z ناشی شده است، همان نقش مؤلفه z بردار موج ذرات موجود در ساختارهای بدنه‌ای را ایفا می‌کند.

ج) پراکندگی در چاه‌های کوانتومی

برای محاسبه نرخ پراکندگی، لازم است ابتدا المان ماتریسی همیلتونین پراکندگی محاسبه شود. با جایگزینی تابع موج (۸ - الف) در رابطه (۲) و با این فرض که پراکندگی با یک تابع انرژی پتانسیل $U_s(r)$ بیان شود $(H_s(r) = U_s(r))$ ، داریم:

$$H_{n'k'_p, nk_p} = \int_{\Omega} e^{-ik'_p \cdot \rho} f_{n'}^*(z) u_{k'_p}^*(\rho) U_s(r) e^{-ik_p \cdot \rho} f_n(z) u_{k_p}(\rho) dr \quad (11)$$

این، المان ماتریسی پتانسیل پراکندگی بین حالت اولیه nk_p و حالت نهایی $n'k'_p$ در چاه‌های کوانتومی است. با گسترش متناوب $U_s(r)$ در تمام فضا، به گونه‌ای که حجم چاه یک دوره تناوب آن باشد، می‌توان مقادیر این تابع را با بسط فوریه آن نمایش داد:

$$U_s(r) = \sum_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}} \quad (12 - الف)$$

شده است، تابع انرژی پتانسیل در هر نقطه از عرض چاه، تابعی متناوب در صفحه xy است و می‌توان آن را به فرم [۶]:

$$V(r) = U(z) + V_{xy}(x, y) \quad (4)$$

نوشت که در آن $U(z)$ مشخصه چاه و $V_{xy}(x, y)$ یک تابع متناوب دو بعدی است. بنابر این همیلتونین مستقل از زمان سیستم به فرم زیر است:

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{\rho}^2 + V_{xy}(\rho) \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(z) \right] \quad (5)$$

که در آن $\rho = (x, y)$ از آنجا که متغیرهای ρ و z در همیلتونین سیستم از هم جدا شدند، تابع موج ذره را به فرم:

$$\psi(r) = \varphi(\rho) f(z) \quad (6)$$

در نظر می‌گیریم. در نتیجه:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{\rho}^2 \varphi(\rho) + V_{xy}(\rho) \varphi(\rho) = E_{xy} \varphi(\rho) \quad (الف - 7)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} f(z) + U(z) f(z) = E_z f(z) \quad (ب - 7)$$

$$E = E_{xy} + E_z \quad (ج - 7)$$

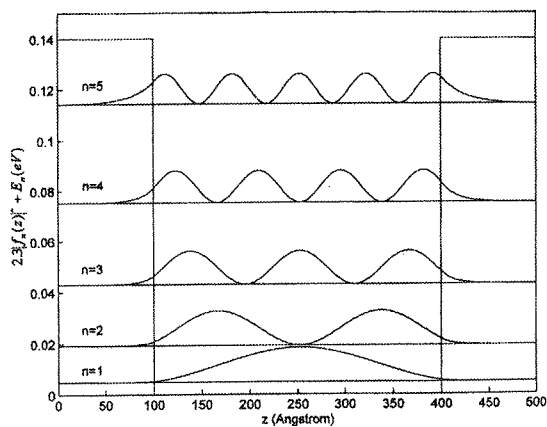
که در آن E انرژی کل ذره است. با توجه به متناوب بودن $V_{xy}(x, y)$ ، توابع موج از نظر فیزیکی قابل قبول $\varphi(\rho)$ ، به صورت امواج بلاخ دو بعدی $e^{ik_p \cdot \rho} u_{k_p}(\rho)$ هستند [۷] که در آن، $k_p = k_x \hat{a}_x + k_y \hat{a}_y$ بردار موج صفحه‌ای است. به این ترتیب مقادیر انرژی E_{xy} را می‌توان با فرم مناسب تر $E(k_p)$ نشان داد. همچنین مقادیر ویژه انرژی E_z به دلیل مشخصه $U(z)$ چاه، گسسته می‌باشند. به این ترتیب تابع موج $\psi_{nk_p}(r)$ و انرژی‌های مجاز E به صورت زیر هستند:

$$\psi_{nk_p}(r) = e^{ik_p \cdot \rho} f_n(z) u_{k_p}(\rho) \quad (الف - 8)$$

$$E = E_n + E(k_p) \quad (ب - 8)$$

۳- تنزل بین زیرباند در چاه‌های کوانتومی (الف) توابع پوش و انرژی‌های مجاز

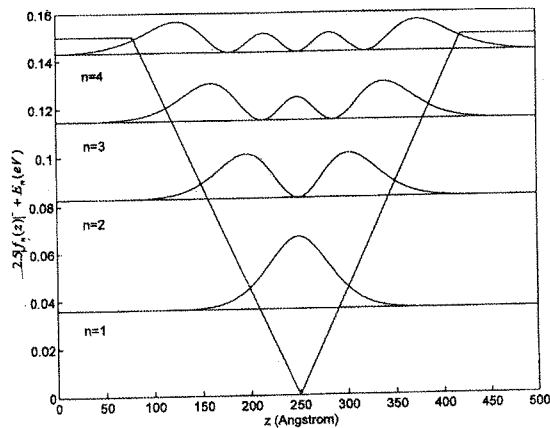
باتوجه به مطالبی که تاکنون گفته شد، برای محاسبه پراکندگی در چاه‌های کوانتومی، لازم است توابع پوش $f_n(z)$ و مقادیر ویژه انرژی E_n زیرباندهای مختلف را در اختیار داشته باشیم. این دو پارامتر، پاسخ‌های معادله (۹) هستند. برای حل عددی این معادله بازای یک $U(z)$ دلخواه، گستره تغییرات z را مشخص کرده و آنگاه از معادله در هر نقطه مشخص استفاده می‌نماییم. مشتقات اول و دوم تابع $f_n(z)$ در یک نقطه مشخص را می‌توان برحسب مقادیر این تابع در نقاط مشخص مجاور تقریب زد [۹]:



شکل (۱) چاه پتانسیل مربعی، توابع پوش و مقادیر ویژه انرژی.

انرژی‌ها بر حسب الکترون-ولت عبارتند از:

$$E_1 = 0.004834, E_2 = 0.01925, E_3 = 0.04292, \\ E_4 = 0.07516, E_5 = 0.1142$$



شکل (۲) چاه پتانسیل مثلثی، توابع پوش و مقادیر ویژه انرژی.

انرژی‌ها بر حسب الکترون-ولت عبارتند از:

$$E_1 = 0.03599, E_2 = 0.08268, E_3 = 0.1147, \\ E_4 = 0.1432,$$

$$A_g = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} U_s(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (۱۲-ب)$$

با جایگزینی این بسط در رابطه (۱۱) و جداسازی انتگرال گیری بر روی متغیرهای z و ρ داریم:

$$H_{n'k'_\rho, nk_\rho} = \sum_{g_z} \sum_{g_\rho} A_{g_\rho, g_z} \left(\int_W f_{n'}^*(z) e^{ig_z z} f_n(z) dz \right) \\ \times \left(\int_S e^{-ik'_\rho \cdot \rho} u_{k'_\rho}^*(\rho) e^{ig_\rho \cdot \rho} e^{ik_\rho \cdot \rho} u_{k_\rho}(\rho) d\rho \right) \quad (۱۳)$$

که در آن g_ρ و g_z مؤلفه‌های بردار \mathbf{g} بوده و $\hat{\alpha}_z$ و $g = g_\rho + g_z \hat{\alpha}_z$ با توجه به متناوب بودن سلول‌های مرکزی $u_{k_\rho}(\rho)$ و اینکه بردارهای $\mathbf{k}'_\rho, \mathbf{k}_\rho$ متعلق به ناحیه بریلیون اول هستند، انتگرال پراکنش دوم رابطه (۱۳)، فقط هنگامی مخالف صفر است که [۴]:

$$g_\rho = \mathbf{k}'_\rho - \mathbf{k}_\rho \quad (۱۴)$$

و بنابراین از رابطه (۱۳) می‌توان نتیجه گرفت که:

$$H_{n'k'_\rho, nk_\rho} = \sum_{g_z} A_{\mathbf{k}'_\rho - \mathbf{k}_\rho, g_z} \left(\int_W f_{n'}^*(z) e^{ig_z z} f_n(z) dz \right) I(\mathbf{k}'_\rho, \mathbf{k}_\rho) \quad (۱۵)$$

که در آن:

$$I(\mathbf{k}'_\rho, \mathbf{k}_\rho) = \int_S u_{\mathbf{k}'_\rho}^*(\rho) u_{\mathbf{k}_\rho}(\rho) d\rho \quad (۱۶)$$

انتگرال همپوشانی سلول‌های مرکزی توابع موج است و برای حامل‌های بار باند هدایت برابر با واحد فرض می‌شود [۸]. با فرض به اندازه کافی بزرگ بودن عرض چاه، می‌توان جمع بندی بر روی g_z را به انتگرال گیری تبدیل نمود:

$$H_{n'k'_\rho, nk_\rho} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} e^{-i\mathbf{k}'_\rho \cdot \rho} U_s(\mathbf{r}) e^{-ig_z z} e^{i\mathbf{k}_\rho \cdot \rho} d\mathbf{r} \right) \times \\ \left(\int_W f_{n'}^*(z) e^{ig_z z} f_n(z) dz \right) \frac{W}{2\pi} dg_z \quad (۱۷)$$

که در آن $A_{\mathbf{k}'_\rho - \mathbf{k}_\rho, g_z}$ را با استفاده از رابطه (۱۲-ب) جایگزین کرده‌ایم. با استفاده از این رابطه می‌توان المان ماتریسی هر مکانیزم پراکندگی را محاسبه و آنگاه با استفاده از قانون طلایی فرمی، نرخ گذر از یک حالت به حالت کوانتومی دیگر را به دست آورد.

پراکندگی توسط فونون‌ها محاسبه می‌شود:

$$H_{nk_p, nk_p} = C(\mathbf{q}) \delta(\mathbf{k}'_p - \mathbf{k}_p - \mathbf{q}) \times \int_w f_n^*(z) e^{\pm i q z} f_n(z) dz \quad (21)$$

در این رابطه، q_p مؤلفه صفحه‌ای و q_z مؤلفه z بردار موج فونون است و $\hat{a}_z = \mathbf{q} = \mathbf{q}_p + q_z \hat{a}_z$. در ضمن وجود تابع دلتا پایستار بودن بردار موج صفحه‌ای را بیان می‌کند. با جایگزینی این المان ماتریسی در قانون طلایی فرمی، می‌توان نرخ پراکندگی از حالت nk_p به حالت کوانتومی $n'k'_p$ را یافت:

$$S(nk_p, n'k'_p) = \frac{2\pi}{\hbar} |C(\mathbf{q})|^2 \left| \int_w f_n^*(z) e^{\pm i q z} f_n(z) dz \right|^2 \delta(\mathbf{k}'_p - \mathbf{k}_p - \mathbf{q}) \delta(E_{n'} + E(\mathbf{k}'_p) - E_n - E(\mathbf{k}_p) - \hbar\omega(\mathbf{q})) \quad (22)$$

اگر بخواهیم نرخ پراکندگی از حالت کوانتومی k_p یک زیرباند به تمام حالت‌های کوانتومی یک زیرباند دیگر را محاسبه کنیم، باید با ثابت فرض کردن n' ، n ، k_p ، بر روی تمام k'_p ها جمع‌بندی نماییم. یک جمع‌بندی دیگر نیز بر روی q_z لازم است تا اثر فونون‌های با بردارهای موج مختلف محاسبه شده باشد. انجام این جمع‌بندی‌ها به دلیل وجود ضرب دو تابع دلتا در عبارت (۲۲) امکان‌پذیر نیست. اما اگر دقت کنیم که دلتای اول بیانگر پایستار بودن بردار موج صفحه‌ای و دلتای دوم بیانگر پایستاری انرژی است، آنگاه می‌توان با تلفیق این اصول پایستاری به رابطه‌ای که هر دو را یک جا بیان نماید دست یافت. به این ترتیب ضرب دو تابع دلتا با یک تابع دلتا که همان مفهوم فیزیکی را می‌رساند جایگزین می‌شود. برای زیرباندهای سهموی باند هدایت (رابطه (۱۰))، خواهیم داشت [۴]:

$$\delta(\mathbf{k}'_p - \mathbf{k}_p - \mathbf{q}) \delta(E_{n'} + E(\mathbf{k}'_p) - E_n - E(\mathbf{k}_p) - \hbar\omega(\mathbf{q})) = \frac{m^*}{\hbar^2 k_p q_p} \delta \left| \pm \cos \theta + \frac{1}{2} q_p / k_p + \frac{m^*}{\hbar^2} (E_{n'} - E_n - \hbar\omega(\mathbf{q})) / (k_p / q_p) \right| \quad (23)$$

در این محاسبه k_p را بر محور q_x فضای \mathbf{q} منطبق گرفته‌ایم. با استفاده از این رابطه در رابطه (۲۲):

$$S(nk_p, n'k'_p) = \frac{2\pi m^*}{\hbar^3 k_p} |C(\mathbf{q})|^2 \left| \int_w f_n^*(z) e^{\pm i q z} f_n(z) dz \right|^2 \times$$

$$f'_n(z_i) = \frac{f_n(z_{i+1}) - f_n(z_{i-1}))}{2\Delta z} \quad (18 \text{ الف})$$

$$f''_n(z_i) = \frac{f_n(z_{i-1}) - 2f_n(z_i) + f_n(z_{i+1}))}{(\Delta z)^2} \quad (18 \text{ ب})$$

که در آن Δz فاصله نقاط مش است (مش بندی یکنواخت). با استفاده از این روابط در رابطه (۹) داریم:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^* (\Delta z)^2} \right] f_n(z_{i-1}) + \left[\frac{\hbar^2}{m^* (\Delta z)^2} + U(z_i) \right] f_n(z_i) + \left[\frac{-\hbar^2}{2m^* (\Delta z)^2} \right] f_n(z_{i+1}) = E_n f_n(z_i) \quad (19)$$

با نوشتن این معادله برای تمام نقاط مش، به یک دستگاه معادلات خطی مقدار ویژه می‌رسیم که با حل آن می‌توان توابع پوش $f_n(z)$ در هر نقطه مش و مقادیر ویژه انرژی E_n را بدست آورد. شکل‌های ۱ و ۲ نتیجه این محاسبه را برای دو چاه کوانتومی مربعی و مثلثی نشان می‌دهد. ماده تشکیل دهنده چاه GaAs فرض شده است $(m^* = 0.067m_0)$.

ب) نرخ تزلزل حامل‌ها

با استفاده از قانون طلایی فرمی می‌توان نرخ گذر حامل‌های بار از هر حالت کوانتومی اولیه nk_p به هر حالت کوانتومی نهایی $n'k'_p$ را تحت تأثیر یک مکانیزم پراکندگی دلخواه یافت. اما هنگامی که گذر بین زیرباندها را مطالعه می‌کنیم، حالت اولیه در یک زیرباند و حالت نهایی در یک زیرباند دیگر خواهد بود و گذر حامل‌های بار با تغییر انرژی همراه است (البته به جز گذرهای بین زیرباندهای که در نمودار $E(k_p)$ به صورت افقی رخ می‌دهند). بنابراین در بین مکانیزم‌های پراکندگی درونی یک چاه کوانتومی (اتم‌های یونیزه، فونون‌ها، حامل‌های بار و ...)، تنها به مکانیزم‌های پراکندگی غیرالاستیک علاقمندیم که مهمترین آنها پراکندگی توسط فونونهاست. پتانسیل پراکندگی مستقل از زمان انواع مختلف فونون‌ها را می‌توان با فرم کلی [۱۰]:

$$U_s(\mathbf{r}) = C(\mathbf{q}) e^{\pm i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (20)$$

نمایش داد. $C(\mathbf{q})$ فونون‌های مختلف در پیوست آمده است. با جایگزینی رابطه (۲۰) در رابطه (۱۷) و استفاده از ویژگی‌های تابع دلتای دیراک، المان ماتریسی

$$\frac{1}{q_p} \delta \left(\mp \cos \theta + \frac{1}{2} q_p / k_p + \frac{m^*}{\hbar^2} (E_{n'} - E_n \mp \hbar \omega(\mathbf{q})) / (k_p / q_p) \right) \quad (24)$$

در این رابطه دیگر k'_p وجود ندارد. ولی می توان به جای آن بر روی q_p جمع بندی نمود (با توجه پایستاری بردار موج صفحه ای، k'_p و q_p از طریق رابطه خطی $k'_p = k_p \pm q_p$ به یکدیگر مربوط می شوند). با انجام جمع بندی بر روی q_p (در مختصات قطبی) و q_z ، خواهیم داشت:

$$W_{nn'}(k_p) = \frac{m^*}{\hbar^3 k_p} \frac{\Omega}{(2\pi)^2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \left[\int_0^{2\pi} \left(\int_0^{\pi/a} \right) C(\mathbf{q}) \right]^2 \times \left| \int_w f_n^*(z) e^{\pm i q_z z} f_n(z) dz \right|^2 \delta \left(\pm \cos \theta + \frac{1}{2} q_p / k_p + \frac{m^*}{\hbar^2} (E_{n'} - E_n \mp \hbar \omega(\mathbf{q})) / (k_p / q_p) \right) dq_z \quad (25)$$

$W_{nn'}(k_p)$ نرخ کل گذر از حالت کوانتومی k_p زیرباند n به تمام حالت های کوانتومی زیرباند n' تحت تأثیر فونون ها را در اختیار قرار می دهد. با جایگزینی $C(\mathbf{q})$ مربوط به هر فونون (پیوست)، می توان عبارت فوق را محاسبه نمود. در شکل های ۳ و ۴ نرخ تنزل بین زیرباندهای چاه های کوانتومی شکل های ۱ و ۲ در اثر فونون های آکوستیک طولی (LA) و فونون های نوری قطبی طولی (PLO) نشان داده شده است. از آنجا که گذر حامل های بار از زیرباندهای بالا به پایین را مطالعه می کنیم (تنزل)، از میان پدیده های جذب و گسیل، تنها گسیل فونون را در نظر گرفته ایم. در ضمن برای مقادیر پارامترهایی که در پراکندگی ها لازم است، از [۱۱] استفاده شده است.

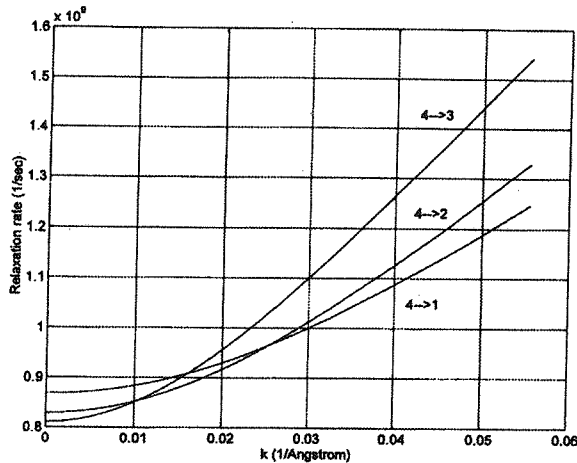
ج) بررسی فیزیکی

ماده مورد مطالعه ما GaAs و مشتقات آن است. در این مواد پراکندگی توسط فونون های آکوستیک طولی (LA) و نوری قطبی طولی (PLO) مورد توجه است [۱۱]. ضمن آنکه پراکندگی توسط فونون های نوری قطبی از بقیه مکانیزم های پراکندگی بسیار قویتر می باشد. با در نظر گرفتن روابط (پ ۱) و (پ ۴)، که ضریب $C(\mathbf{q})$ این دو مکانیزم را در اختیار قرار می دهد، می توانیم استدلالات توجیهی خود را برای توصیف منحنی های

پراکندگی تبیین نماییم. منحنی های شکل های ۳ و ۴ نشان می دهند که با دور شدن بردار موج اولیه الکترون از مرکز ناحیه بریلیون، نرخ پراکندگی توسط فونون های آکوستیک افزایش و فونون های نوری قطبی کاهش می یابد. این به دلیل آن است که گذر از یک k_p یک زیرباند به حالت های کوانتومی زیرباند دیگر، محتاج تغییر بیشتر بردار موج الکترون است. چون این تغییر بردار موج را باید فونون تأمین کند، بنابراین فونون های با بردار موج بزرگتر در پراکندگی شرکت می کنند. حال چون پراکندگی توسط فونون های آکوستیک با اندازه بردار موج فونون نسبت مستقیم و پراکندگی توسط فونون های نوری قطبی با توان دوم اندازه بردار موج نسبت معکوس دارد، بزرگتر بودن بردار موج فونون، افزایش نرخ پراکندگی فونون های آکوستیک و کاهش آن را برای فونون های نوری در پی خواهد داشت. مطلب قابل توجه دیگر آنکه با افزایش فاصله زیرباندها، نرخ تنزل برای فونون های آکوستیک افزایش و برای فونون های نوری قطبی کاهش یافته است. این به دلیل آن است که هر چه فاصله زیرباندها بیشتر باشد، گذر بین زیرباند حامل ها مستلزم تغییر بردار موج بیشتری است و با استدلال مشابه آنچه در بالا گفتیم باید نرخ پراکندگی فونون های آکوستیک افزایش و فونون های نوری قطبی کاهش یابد. در شکل (۴ - ب) دیده می شود که برای k_p های کوچک، نرخ گذر از زیرباند چهارم به سوم چاه کوانتومی شکل ۲ توسط فونون های نوری صفر است. همانگونه که می دانیم، تنزل توسط فونون های نوری با تغییر انرژی ثابت $\hbar \omega_0$ همراه است [۱۰]. حال اگر فاصله انرژی موقعیت کوانتومی اولیه الکترون (یک k_p خاص در زیر باند اولیه) و هیچیک از موقعیت های کوانتومی زیرباند مقصد با این مقدار انرژی برابر نباشد، آنگاه هیچ تنزلی مجاز نبوده و نرخ پراکندگی صفر خواهد بود. در چاه کوانتومی شکل ۲، فاصله انرژی عمودی زیرباندهای ۳ و ۴ کوچکتر از انرژی فونون های نوری است. بنابراین این گذر از زیر باند ۴ بازای بازای k_p های کوچک امکان پذیر نیست. با افزایش k_p ، فاصله انرژی موقعیت های کوانتومی زیرباند ۴ با ته زیرباند ۳ افزایش یافته و از یک k_p خاص به بعد، گذر حامل های بار به زیرباند ۳ امکان پذیر خواهد بود.

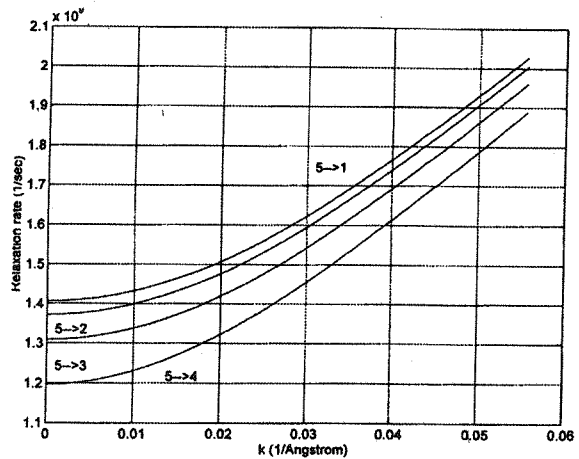
طبق رابطه (۲۵)، عامل دیگری که در پراکندگی حامل های بار از یک زیرباند به زیرباند دیگر مؤثر است، عبارت $\left| \int_w f_n^*(z) e^{\pm i q_z z} f_n(z) dz \right|^2$ می باشد که میزان

توابع پوش زیرباند های درون چاه کوچکتر و توابع پوش زیرباند های چاه بزرگتر کمتر می شود و انتظار داریم نرخ تنزل بین زیرباند های بیرون و درون چاه کمتر شود. در شکل ۶ نرخ تنزل حامل ها از زیرباند ۲ به زیرباند ۱ برای هر یک از این چاه ها رسم شده و همانگونه که انتظار داریم، نرخ تنزل برای چاه نامتقارن کوچکتر می باشد.

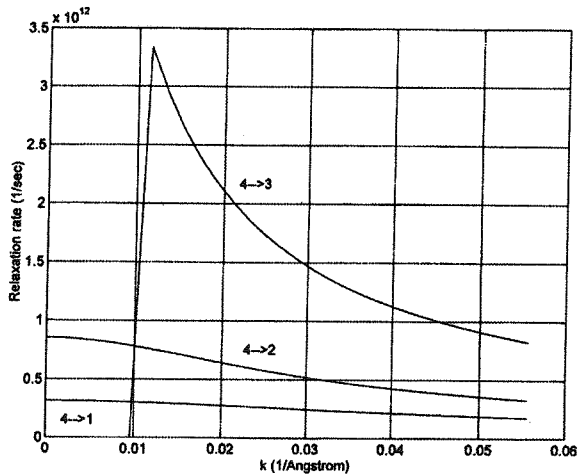


الف) پراکندگی توسط فونون های آکوستیک طولی (LA).

همپوشانی توابع پوش زیرباند مبدأ و مقصد را بیان می نماید. برای مشاهده اثر این عامل، چاه های کوانتومی پله ای نشان داده شده در شکل ۵ را در نظر می گیریم. شکل (۵ - الف)، یک چاه متقارن می باشد. در چاه شکل (۵ - ب) سعی شده با ایجاد عدم تقارن، میزان همپوشانی بین توابع پوش تغییر کند (کمتر شود) تا به این ترتیب بتوان اثر انتگرال گفته شده را مطالعه نمود. همانگونه که مشاهده می شود، در اثر عدم تقارن، همپوشانی بین

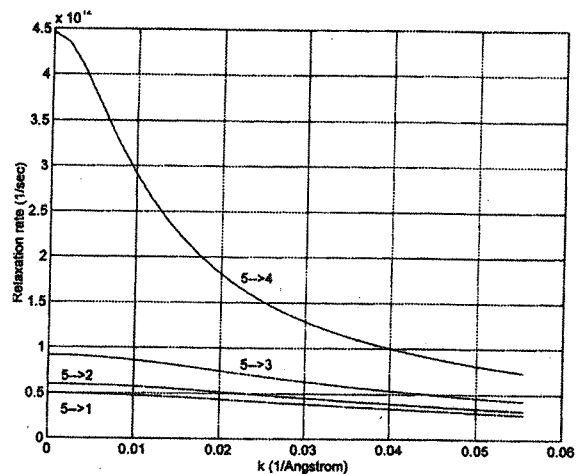


الف) پراکندگی توسط فونون های آکوستیک طولی (LA).



ب) پراکندگی توسط فونون های نوری قطبی طولی (PLO).

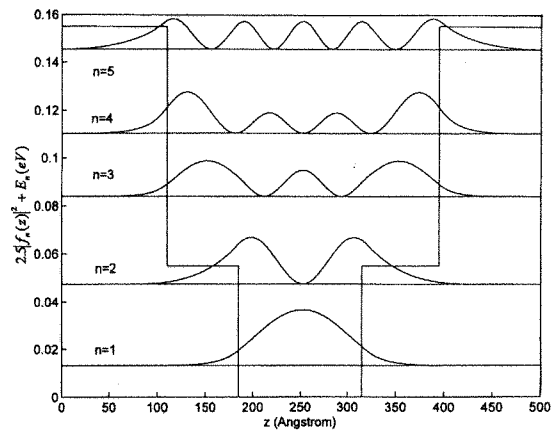
شکل (۴) نرخ تنزل بین زیرباند های چاه کوانتومی مثلثی شکل ۲.



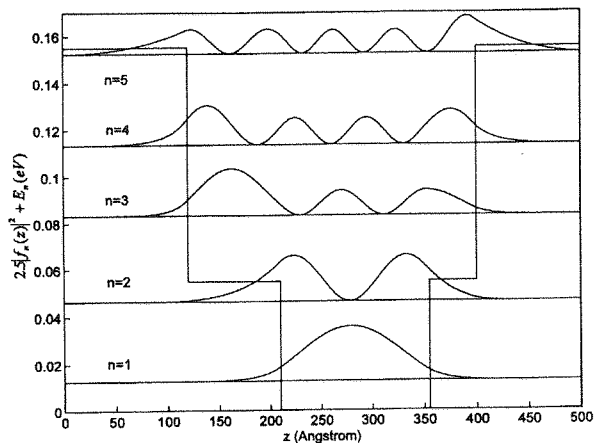
ب) پراکندگی توسط فونون های نوری قطبی طولی (PLO).

شکل (۳) نرخ تنزل بین زیرباند های چاه کوانتومی مربعی شکل ۱.

همانگونه که قبلاً گفته شد، یکی از کاربردهای مهم گذرهای بین زیرباند، دستیابی به عملکرد لیزری در محدوده مادون قرمز شدید است. اکنون به عنوان یک مثال، ساختار چاه کوانتومی شکل (۵-ب) را در نظر می‌گیریم. برای دستیابی به عملکرد لیزری بین زیرباندهای n و n' ، باید نرخ تنزل بین این دو زیرباند کوچک باشد تا پس از ایجاد وارونگی جمعیت، این وارونگی برای مدت زمان مناسبی حفظ شود تا بتوان فرایند گسیل القایی را انجام داد. به نظر می‌رسد در چاه کوانتومی شکل (۵-ب)، انتخاب زیرباندهای ۲ و ۳ برای این منظور مناسب باشد، زیرا محدود شدن زیرباند ۲ به چاه کوچکتر، موجب کم شدن همپوشانی بین تابع پوش این زیرباند و زیرباندهای بالاتر (و از جمله زیرباند ۳) می‌شود که این خود نرخ تنزل را کوچک می‌کند. حال فرض می‌کنیم وارونگی جمعیت با پمپ شدن حامل‌ها از زیرباند ۱ (که در شرایط تعادل حرارتی، به علت پایین بودن سطح انرژی، حامل‌های بار بیشتری در مقایسه با زیرباندهای بالاتر دارد) به زیرباند ۵ و آنگاه تنزل آنها به زیرباندهای ۴ و ۳ تحقق یابد. حامل‌های روی زیرباند ۵ (یا ۴) علاوه بر تنزل به زیرباند ۳، می‌توانند مستقیماً به زیرباند ۲ نیز تنزل یابند. اما اولاً زیرباند ۲ درون چاه کوچکتر جایگزیده است و بنابراین این همپوشانی بین تابع پوش آن با زیرباندهای ۴ و ۵ کمتر از همپوشانی بین تابع پوش زیرباند ۳ و زیرباندهای ۴ و ۵ است. ثانیاً به دلیل فاصله انرژی بیشتر زیرباند ۲ با زیرباندهای ۴ و ۵ در مقایسه با فاصله انرژی کمتر زیرباند ۳ و زیرباندهای ۴ و ۵، تنزل حامل‌ها از زیرباندهای ۴ و ۵ به زیرباند ۲ مستلزم تغییرات بزرگتر بردار موج حامل‌هاست. حال از آنجا که حامل‌های بار عمدتاً به واسطه برهم‌کنش با فونون‌های نوری قطبی پراکنده می‌شوند، تغییر بزرگتر بردار موج به مفهوم نرخ تنزل کمتر است. در شکل (۷-الف) و (۷-ب) به ترتیب نرخ تنزل از زیرباندهای ۵ و ۴ به زیرباندهای ۲ و ۳ با یکدیگر مقایسه شده و ملاحظه می‌شود که تنزل به زیرباند ۲ سریعتر است. مطلب دیگری که برای عملکرد لیزری مناسب است بررسی شود، تنزل حامل‌ها به زیرباند ۱ است. مطلوب آن است که پس از آنکه حامل‌ها به واسطه گسیل القایی به زیرباند ۲ تنزل یافتند، به سرعت به زیرباند ۱ تنزل یابند تا دوباره در فرایند پمپ شدن شرکت نمایند. در شکل (۷-ج) نرخ تنزل از زیرباند ۲ به ۱ با نرخ تنزل از ۳ به ۱ مقایسه شده است

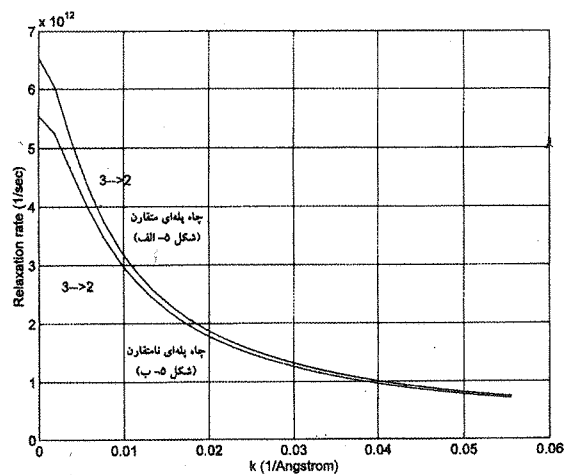


الف) چاه پله‌ای متقارن.



ب) چاه پله‌ای نامتقارن.

شکل (۵) چاه‌های کوانتومی پله‌ای، توابع پوش و انرژی‌های مجاز.



شکل (۶) اثر همپوشانی توابع پوش در نرخ تنزل بین زیرباندها.

۴- خلاصه

روابط پراکندگی را برای سیستم چاه کوانتومی به صورت دقیق تبیین نمودیم و با استفاده از آنها تنزل بین زیرباند های چاه های کوانتومی باند هدایت را مطالعه کردیم. برای چند چاه کوانتومی GaAs، این نرخ ها را محاسبه کرده و ملاحظه کردیم که با تغییر شکل چاه می توان سرعت تنزل حامل ها بین زیرباندهای مختلف را تغییر داد. همچنین عملکرد لیزری در یک چاه پله ای نامتقارن مطالعه شد. در بررسی فیزیکی خود سعی کردیم به یک درک شهودی نسبت به برهم کنش بین فونون ها و حامل های بار زیرباندهای مختلف دست یابیم. در این مطالعه، ملاحظه عملی خاصی در مورد عرض چاه، بزرگی سدهای پتانسیل، وجود نقص های کریستالی و بارهای سطحی موجود در فصل مشترک لایه ها و تأثیر این پارامترها در پراکندگی حامل های بار نداشته ایم که می تواند در کارهای بعدی مدنظر باشد. وجود یا عدم وجود یک مکانیزم پراکندگی و پارامترهای پراکندگی های گوناگون، تابع نوع ماده است که می تواند مورد مطالعه قرار گیرد. در مطالعه خود از پتانسیل های پراکندگی مربوط به یک ساختار کریستالی بدنه ای استفاده کردیم که اگر عرض چاه کوچک باشد، استفاده از این پتانسیل ها مجاز نبوده و روابط نیاز به اصلاح دارد.

پیوست

ضریب $C(q)$ در رابطه (۲۰) برای فونون های مختلف به صورت زیر است [۱۰]:

- تقریب پتانسیل تغییر شکل (فونون های آکوستیک):

$$C_{AP}(q) = D_A \left(\frac{\hbar}{2\omega\rho\Omega} \right)^{\frac{1}{2}} \left(N(\omega) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right)^{\frac{1}{2}} |q| \quad (۱ \text{ پ})$$

- تقریب پتانسیل تغییر شکل (فونون های نوری):

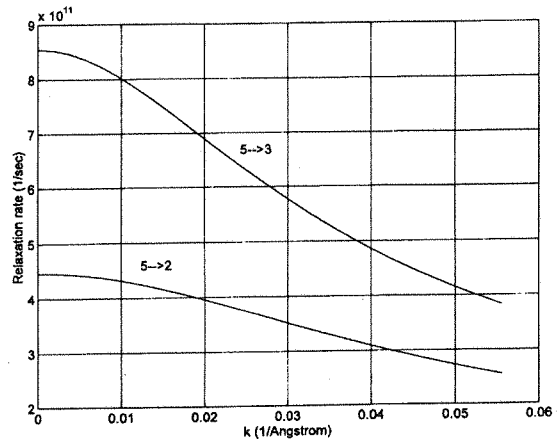
$$C_{OP}(q) = D_O \left(\frac{\hbar}{2\omega\rho\Omega} \right)^{\frac{1}{2}} \left(N(\omega) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (۲ \text{ پ})$$

- پراکندگی پیزوالکتریک (فونون های آکوستیک):

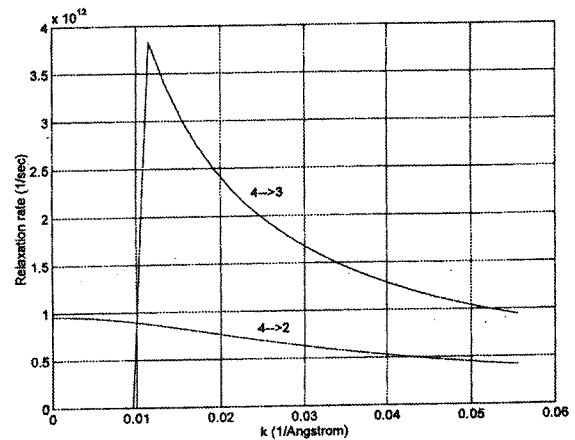
$$C_{PAP}(q) = \frac{q e_{PZ}}{\varepsilon(0)} \left(\frac{\hbar}{2\omega\rho\Omega} \right)^{\frac{1}{2}} \left(N(\omega) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (۳ \text{ پ})$$

- پراکندگی قطبی (فونون های نوری):

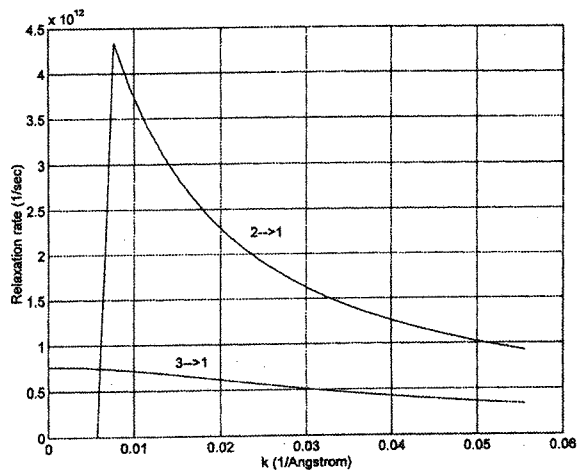
که عملکرد مناسبی را نشان می دهد. کم بودن نرخ تنزل از ۳ به ۱ به دلیل فاصله زیاد این دو زیرباند و همچنین محدود بودن زیرباند ۱ در چاه کوچکتر است.



الف) تنزل از زیرباند ۵.



ب) تنزل از زیرباند ۴.



ج) تنزل از زیرباندهای ۳ و ۲ به زیرباند ۱.

شکل (۷) تنزل در چاه نامتقارن شکل ۵ - ب.

Deformation Potential پتانسیل تغییر شکل
 Harmonic Scattering پراکندگی هارمونیک
 Envelope Function تابع پوش
 Intersubband Relaxation تنزل بین زیرباند
 Central Cell سلول مرکزی
 Spectroscopy طیف‌نمایی
 Longitudinal Acoustic (LA) Phonon فونون آکوستیک طولی
 Polar Longitudinal Optical (PLO) Phonon فونون نوری قطبی طولی
 Fermi Golden Rule قانون طلایی فرمی
 Far Infrared مادون قرمز شدید
 Mesh Point نقطه مش
 Population Inversion وارونگی جمعیت
 Coherence همدوس
 Hamiltonian همیلتونین

$$C_{POP}(\mathbf{q}) = \frac{iq\omega}{|\mathbf{q}|} \left(\frac{\hbar}{2\Omega} \right)^{\frac{1}{2}} \times \left(N(\omega) + \frac{1}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{\varepsilon(\infty)} - \frac{1}{\varepsilon(0)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{پ ۴})$$

برای فونون‌های آکوستیک $\omega(\mathbf{q}) = V_s q$ و برای فونون‌های نوری $\omega(\mathbf{q}) = \omega_0 = cte$ می‌باشد. در روابط بالا، $N(\omega)$ توزیع بوز-اینشتین، V_s سرعت صوت در ماده، ρ جرم حجمی ماده، Ω حجم کل ساختار، $\hbar\omega_0$ انرژی فونون‌های نوری، D_0 و D_1 به ترتیب پتانسیل تغییر شکل فونون‌های آکوستیک و نوری، e_{pz} ثابت پیزوالکتریک ماده و $\varepsilon(0)$ و $\varepsilon(\infty)$ ثابت دی‌الکتریک فرکانس پایین و فرکانس بالای ماده می‌باشند.

واژه‌نامه

انتگرال همپوشانی Overlap Integral
 بدنه‌ای Bulk
 بردار موج صفحه‌ای In - plane Wave Vector

مراجع

- [1] B. E. A. Saleh and M. c. Teich, C. Teich, Fundamentals of Photonics (John Wiley & Sons, New York, 1991).
- [2] K. M. Lau and W. Xu, IEEE J. Quantum electron. **28**, 400 (1992).
- [3] J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori, D. Sivco, A.L. Hutchinson, S.G. Chu, and A. Y. Cho, Science **64**, 1144 (1994).
- [4] M. S. Landstrum, Modular Series on Solid State Devices Vol. X, Transport Phenomena for Device Applications (Addison-Wesley, California, 1990).
- [5] J. Singh, Physics of Semiconductors and Their Heterostructures (McGraw-Hill, New York, 1993).
- [6] A. Yariv. Quantum Electronics, 3rd edition (John-Wiley & Sons, New York, 1989).
- [7] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, (Saunders College, Fort worth, 1976).
- [8] B. Nag, Electron Transport in Compound Semiconductors (Springer-Verlag, New York, 1980).
- [9] آنالیز عددی، ترجمه علی اکبر عالم زاده، اسماعیل بابلیان و محمدرضا امیدوار، چاپ سوم (نشر منصور، ۱۳۷۵).
- [10] C. M. Wolf, N. Holonyak, Jr., and Gregory E. Stillman, Physical Properties of Semiconductors (Prentice Hall, New Jersey, 1989).
- [11] U. Bockelmann, G. Bastard, Phys. Rev. B **42**, 8947 (1990).