

XÁC ĐỊNH PHỔ NĂNG LƯỢNG VÀ HÀM SỐNG CỦA ĐIỆN TỬ TRONG CÁC CHẤM LƯỢNG TỬ PHÒNG CẦU BẰNG PHƯƠNG PHÁP PHẦN TỬ HỮU HẠN.

Lê Ngọc Minh^{1*}, Lê Quý Thông¹, Lê Thị Ngọc Bảo¹

¹ Khoa Vật lý, Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế

*Email: lengocminh63@gmail.com

TÓM TẮT

Trong bài báo này chúng tôi nghiên cứu chuyển động của điện tử trong chấm lượng tử phòng cầu InAs/GaAs bằng cách giải phương trình Schrodinger cho điện tử trong gần đúng khối lượng hiệu dụng. Ảnh hưởng của tính không cầu của chấm lượng tử lên các hàm riêng và trị riêng đã được nghiên cứu trong trường hợp rào thế hữu hạn. Hàm sóng và các mức năng lượng của điện tử đã được tính số bằng phương pháp phần tử hữu hạn trên phần mềm COMSOL Multiphysics.

Từ khóa: Finite element method; quantum dot.

1. MỞ ĐẦU

Trong những năm gần đây việc nghiên cứu về các chấm lượng tử (QDs) tiếp tục thu hút sự chú ý cả lý thuyết lẫn thực nghiệm. Các cấu trúc thấp chiều này, chuyển động của điện tử bị hạn chế theo cả 3 chiều, đóng vai trò quan trọng trong nhiều ứng dụng quang điện tử như laser QD, transistor một điện tử. Thực nghiệm gần đây đã chứng minh rằng các tính chất quang học của QDs có thể điều khiển được bằng cách thay đổi hình dạng của chúng [1-5]. Ảnh hưởng của tính không cầu của QDs lên phổ năng lượng và hàm sóng của các điện tử trong QDs đã được nghiên cứu về mặt lý thuyết bởi một loạt các tác giả [6-10]. Nhiều phương pháp tính số như khai triển sóng phẳng [11], lý thuyết k-p đa vùng [12], phương pháp phần tử hữu hạn [13] hoặc phương pháp sai phân hữu hạn [14] đã được sử dụng để khảo sát tính chất của điện tử trong các cấu trúc thấp chiều như giếng lượng tử, dây lượng tử và các chấm lượng tử.

Trong bài báo này chúng tôi sử dụng phương pháp phần tử hữu hạn để xác định hàm sóng và các mức năng lượng của điện tử trong QDs phòng cầu với rào thế hữu hạn bằng cách giải phương trình Schrodinger cho điện tử trong gần đúng khối lượng hiệu dụng kết hợp với việc tính số bằng phần mềm COMSOL Multiphysics.

2. CƠ SỞ LÝ THUYẾT VÀ MÔ HÌNH.

Ta xét hệ gồm chấm lượng tử InAs dạng phòng cầu có dạng ellipsoid tròn xoay với trục đối xứng là trục z nằm trong nền GaAs dạng hình trụ (hình 1).

Sử dụng hệ tọa độ trụ (r, ϕ, z) , phương trình Schrodinger cho điện tử trong gần đúng khối lượng hiệu dụng có dạng:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left(\frac{1}{m^*} \nabla \psi(r, \phi, z) \right) + V(r, \phi, z) \psi(r, \phi, z) = E \psi(r, \phi, z). \quad (1)$$

Ở đây \hbar , m^* , V , E và $\psi(r, \phi, z)$ lần lượt là hằng số Planck, khối lượng hiệu dụng, thế năng, năng lượng và hàm sóng của điện tử. Do hệ có tính đối xứng trụ nên m^* và thế năng V không phụ thuộc vào góc ϕ và hàm sóng có thể tìm dưới dạng tách biến:

$$\psi(r, \phi, z) = \varphi(r, z) \Phi(\phi). \quad (2)$$

Thay (2) vào (1) và tách biến ta được các phương trình sau:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r}{m^*} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + \left[\frac{2}{\hbar^2} E - V - \frac{m^2}{m^* r^2} \right] \varphi(r, z) = 0, \quad (3)$$

$$\Phi''(\phi) + m^2 \Phi(\phi) = 0. \quad (4)$$

Nghiệm của (4) thỏa mãn điều kiện đơn trị có dạng:

$$\Phi_m(\phi) = e^{im\phi} \quad (5)$$

ở đây m là một số nguyên. Khi đó phương trình (3) trở thành:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r}{m^*} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \right] + \left(V + \frac{\hbar^2 m^2}{2m^* r^2} \right) \varphi(r, z) = E \varphi(r, z). \quad (6)$$

Việc giải số phương trình (6) trở thành bài toán trị riêng của phương trình đạo hàm riêng và được giải bằng phương pháp phần tử hữu hạn. Ở đây ta sử dụng phần mềm COMSOL Multiphysics để giải phương trình đạo hàm riêng dạng:

$$\nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + au + \vec{\beta} \cdot \nabla u = \lambda u. \quad (7)$$

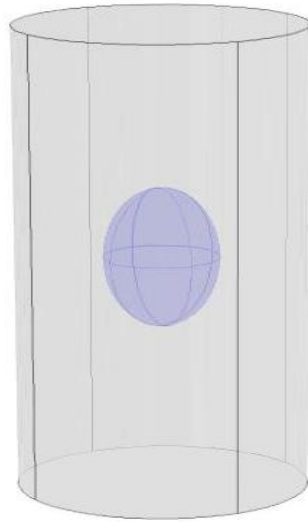
So sánh (6) và (7), ta nhận được:

$$c = \frac{\hbar^2}{2m^*}, \quad \alpha = \gamma = 0, \quad a = V + \frac{\hbar^2 m^2}{2m^* r^2}, \quad \vec{\beta} = -\frac{\hbar^2}{2m^* r} \vec{e}_r \quad \text{và} \quad \lambda = E \quad (8)$$

Do ta chỉ quan tâm đến các trạng thái của điện tử bị cầm tù trong miền đang xét nên trên bề mặt của hình trụ ta sử dụng điều kiện biên Dirichlet ($\varphi = 0$). Trên biên phân cách giữa hai loại vật liệu InAs/GaAs, do tính liên tục của hàm sóng ta sử dụng điều kiện biên Neumann:

$$\frac{1}{m^*} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{InAs} = \frac{1}{m^*} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{GaAs} \quad (9)$$

Các tham số vật lý của vật liệu InAs và GaAs cho trong bảng 1 còn các kích thước của mô hình tính toán cho trong bảng 2.



Hình 1. Chấm lượng tử phòng cầu InAs trong nền GaAs.

Bảng 1. Các tham số vật lý của InAs và GaAs.

Tham số	m^* / m_e	$V(eV)$
InAs	0.023	0
GaAs	0.067	0.697

Bảng 2. Kích thước của mô hình.

Hình trụ GaAs	Bán kính		Chiều cao
	50 nm		100 nm
Chấm lượng tử InAs dạng thuận	Các bán trục		
	a = 10 nm	b = 10 nm	c = 15nm
	a = 15 nm	b = 15 nm	c = 10nm

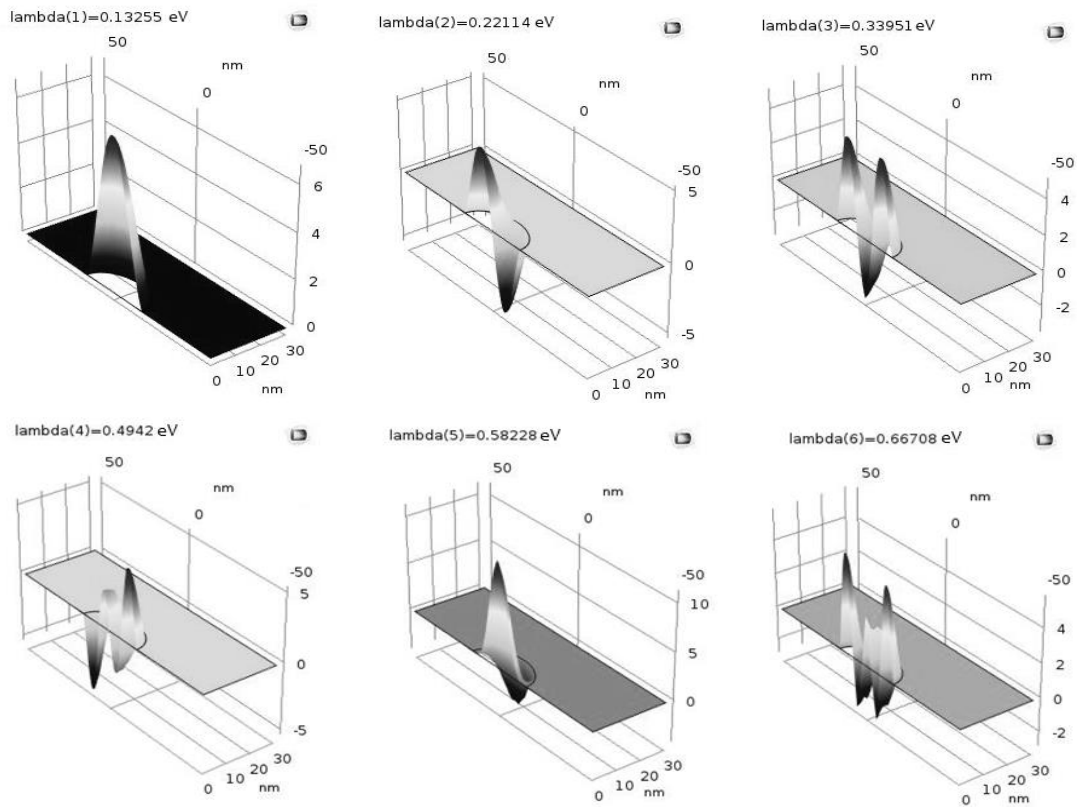
3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Ta khảo sát các trạng thái liên kết của điện tử trong chấm lượng tử bằng cách tìm nghiệm của (6) ứng với các giá trị khả dĩ của m và các giá trị của năng lượng E nhỏ hơn độ cao rào thế giữa hai lớp vật liệu là $V = 0,697eV$. Kết quả tính toán cho thấy: khi $m = 0$ ta có 6 trạng thái liên kết, khi $m = 1$ có 3 trạng thái liên kết, khi $m = 2$ có 2 trạng thái liên kết và khi $m \geq 3$ không tồn tại trạng thái liên kết. Các giá trị năng lượng ứng với các trạng thái liên kết này cho trên bảng 3. Việc không xuất hiện các trạng thái liên kết khi $m \geq 3$ có thể được giải thích như sau: phương trình (6) có dạng phương trình sóng của điện tử chịu tác dụng của thế hiệu dụng $V_{eff} = V + \frac{\hbar^2 m^2}{2m^* r^2}$, do đó ứng với các giá trị m lớn sao cho $\frac{\hbar^2 m^2}{2m^* a^2}$ có giá trị lớn hơn độ cao rào thế thì giá trị năng lượng thấp nhất của điện tử trong QD sẽ lớn hơn độ cao rào thế và khi đó không xuất hiện trạng thái liên kết.

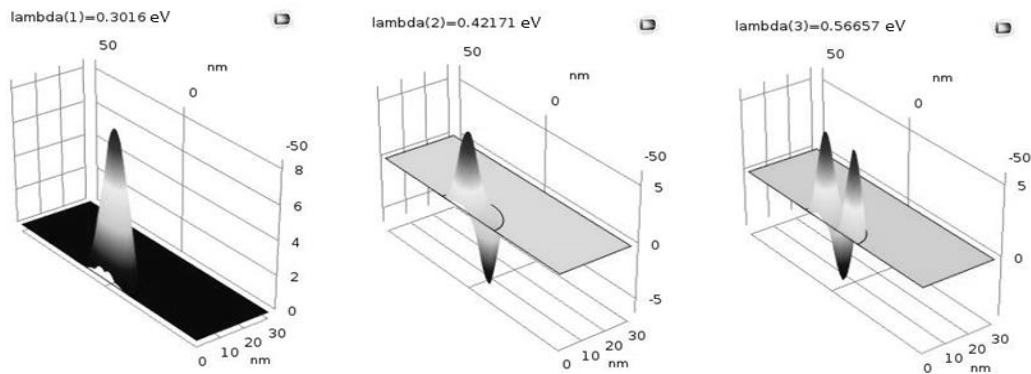
Đồ thị của hàm sóng của các trạng thái này cho trên hình 2, hình 3 và hình 4.

Bảng 3. Các mức năng lượng của điện tử trong QD.

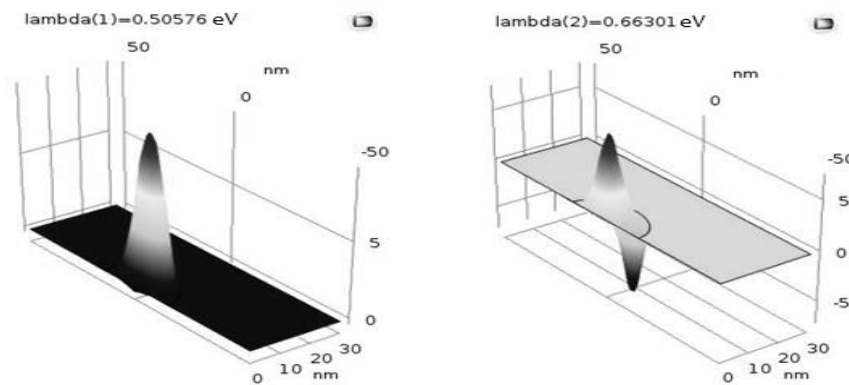
$m = 0$					
0,13255 eV	0,22114 eV	0,33951 eV	0,4942 eV	0,58228 eV	0,66708 eV
$m = 1$			$m = 2$		
0,3016 eV		0,42171 eV		0,56657 eV	
0,50576 eV			0,66301 eV		



Hình 2. Hàm sóng của các trạng thái liên kết trong QD khi $m = 0$.



Hình 3. Hàm sóng của các trạng thái liên kết trong QD khi $m = 1$.



Hình 4. Hàm sóng của các trạng thái liên kết trong QD khi $m = 2$.

Từ các đồ thị trên ta thấy rằng, ứng với mỗi giá trị của m , trong trạng thái với giá trị năng lượng thấp nhất điện tử có xu hướng định xứ tại tâm của QD.

4. KẾT LUẬN

Bằng phương pháp phần tử hữu hạn trên phần mềm COMSOL Multiphysics, chúng tôi đã xác định được hàm sóng và các mức năng lượng của điện tử trong chấm lượng tử InAs nhúng trong nền GaAs. Kết quả tính toán cho thấy số các trạng liên kết phụ thuộc mạnh vào độ cao rào thế giữa hai loại vật liệu, số lượng tử m và kích thước của chấm. Ngoài ra, khi m đã cho, trong trạng thái với giá trị năng lượng thấp nhất, điện tử có xu hướng định xứ tại tâm của chấm lượng tử. Phương pháp này cũng có thể được sử dụng cho các QD với dạng hình học khác.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1].X. G. Peng, L. Manna, W. Yang, J. Wickham, E. Scher, A. Kadavanich and A. P. Alivisatos (2000). Shape control of CdSe nanocrystals, *Nature* Vol. 404, pp 59-61.
- [2].V. F. Puntès, K. M. Krishnan and A. P. Alivisatos (2001). Colloidal nanocrystal shape and size control: the case of cobalt, *Science*, Vol. 291, pp. 2115-2117.
- [3]. J. Hu, L. Li, W. Yang, L. Manna, L. Wang and A. P. Alivisatos (2001) Linearly Polarized Emission from Colloidal Semiconductor Quantum Rods, *Science*, Vol. 292, pp. 2060-2063.
- [4]. M. B. Mohamed, C. Burda and M. A. El-Sayed (2001). Shape dependent ultrafast relaxation dynamics of CdSe nanocrystals: Nanorods vs nanodots, *Nano Lett.* Vol. 1, pp. 589-593.
- [5]. L. Li, J. Hu, W. Yang and A. P. Alivisatos (2001). Band gap variation of size-and shape-controlled colloidal CdSe quantum rods, *Nano Lett.* Vol. 1, pp. 349-351.
- [6]. Al. L. Efros and A. V. Rodina (1993). Band-edge absorption and luminescence of nonspherical nanometer-size crystals, *Phys. Rev. B*, Vol 47, pp. 10005-10007.
- [7]. F. Comas, C. Trallero-Giner, N. Studart, G. E. Marques (2002) Interface optical phonons in spheroidal quantum dots, *J. Phys.: Condens. Matter*, Vol.14, pp. 6469–6481.

- [8]. A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, V.P. Gerdt, V.A. Rostovtsev, S.I. Vinitsky, V.L. Derbov, V.V. Serov (2010) Symbolic-Numeric Algorithms for Computer Analysis of Spheroidal Quantum Dot Models. *Lecture Notes in Computer Science*, Vol. 6244 , pp 106-122.
- [9]. A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, L. L. Hai, S. I. Vinitsky, E. M. Kazaryan, H. A. Sarkisyan and V. L. Derbov (2012). Spectral and optical characteristics of spheroidal quantum dots. *J. Phys. Conf. Ser.* Vol. 393, pp. 012011- 012021.
- [10].V. A. Fonoberov, E. P. Pokatilov and A. A. Balandin (2002). Exciton states and optical transitions in colloidal CdS quantum dots: Shape and dielectric mismatch effects, *Phys. Rev. B*, Vol. 66, pp. 085310-1- 085310-13.
- [11] M.Califanno and P.Harrison (2000). Quantum box energies as a route to the ground state levels of self-assembled quantumdot's. *J.Appl. Phys.*, Vol. 88, pp. 5870 - 5874.
- [12] Hongtao Jiang, Jasprit Singh (1997). Strain distribution and electronic spectra of InAs/GaAs self-assembled dots: an eightband study. *Phys. Rev. B*. Vol. 56, pp. 4696 – 4701.
- [13] V.N. Melnik, M. Willatzen. (2004). Finite element analysis of coupled electronic states in quantum dot nanostructures. *Modeling simulation material science and Engineering*, Vol.12, No. 3, pp. 465 – 477.
- [14] D.El-Moghraby, R.G. Johnson, P.Harrison (2003). The effect of Inter-dot separation on the finite different e solution of vertically aligned coupled quantum dots. *Computer physics communications*. Vol. 155, pp. 236 – 243.