

## تقريب الأحتواء القوي للشوائب المانحة في نقاط كم كروية GaAs تحت تأثير الضغط الهيدروستاتيكي

م.د لافي فرج عكلة م. مصطفى عبد الستار عبد الجبار

قسم الفيزياء/كلية العلوم/جامعة ذي قار

### الخلاصة:

يحسب هذا البحث تصحيحات الطاقة للرتبة الأولى للحالات الكمية s,p للشائبة الهيدروجينية الضحلة في مركز وداخل وخارج النقطة الكمية الكروية GaAs تحت تأثير الضغط الهيدروستاتيكي. تمت هذه الحسابات باستخدام تقريب الأحتواء القوي ضمن تقريب الكتلة الفعالة الذي يفترض بأن حجم النقطة يجب أن يكون أصغر من نصف قطر بور المؤثر. إن تأثير الضغط يؤدي إلى زيادة الأحتواء الكمي للشائبة داخل النقطة وبالتالي إلى زيادة تصحيحات الطاقة لأي نصف قطر نقطة وموقع شائبة. إن هذه التصحيحات تعتمد على موقع الشائبة وتأثير الضغط أقل ما يمكن عندما تكون الشائبة عند حافة النقطة.

## **Strong-confinement approach for donor impurities in GaAs spherical quantum dots under the pressure effect**

**Lafy F. AL-Badry and Mustapha A. Setar A. Jebar**

**Department of Physics, College of Science/ University of Thi-Qar.**

### **Abstract**

This paper calculates first-order energy correction for the states  $s$  and  $p$  of shallow hydrogenic impurity in center, interior and exterior GaAs spherical quantum dots under the effect of hydrostatic pressure. These calculations studied by using the strong confinement approach within the effective mass approximation, which consider the size of the quantum dot, must be smaller than effective Bohr radius. Hydrostatic pressure rise quantum confinement of impurity interior Q.D, thus, energy correction increases for any radius of Q.D and position of impurity. These corrections depend on the position of impurity and pressure effect at the minimum value at the edge of Q.D.

**Keywords:** quantum dot, donor impurity and strong-confinement approach

## المقدمة:

درس عدد من العلماء في السنوات العشرين الأخيرة حالات الشائبة في أنظمة أحتواء (confinement systems) متنوعة مثل أنظمة ذات البعدين (2D) وذات البعد الواحد (1D) التي تسمى الأسلاك الكمية (Quantum Wire) وذات البعد الصفري (0D) والتي تسمى النقاط الكمية (Quantum Dots) (Ferreya *et al.* 1997), (Zhu *et al.* 1990), (Zhu *et al.* 1989).

إن مسائل النقاط الكمية تعتبر مهمة لأن خواص التراكيب ذات الأبعاد الواطنة يمكن الحصول عليها بواسطة تغيير نصف قطر النقطة الكمية. عندما يكون نصف قطر النقطة الكمية كبير جداً، فإن الذرة الشائبة داخل النقطة الكمية سوف تسلك كذرة هيدروجين حرة ثلاثية البعد (3D)، لأن الخواص الفيزيائية للإلكترونات سوف تختلف.

يمكن زيادة أحتواء الشائبة بزيادة نصف قطر النقطة الكمية، وبذلك سوف تزداد الطاقة الحركية للإلكترون والتي بدورها سوف تتغلب على جهد التجاذب بين الإلكترون والذرة الشائبة عندئذٍ سوف تتغير الطاقة الكلية من سالبة إلى موجبة (Hsieh 2000). إن تأثير الحجم الكمي في ثلاثة أبعاد للنقاط الكمية يؤدي إلى تصنيع مستويات طاقة متميزة تشبه المستويات الذرية في حزم التوصيل والتكافؤ والتي بدورها تؤدي إلى تغيرات هائلة في الخواص الفيزيائية التي لا تظهر في المواد الأعتيادية (bulk materials) (Karimi *et al.* 2014).

تبين الحسابات إن الأحتواء وطاقة الربط Binding Energy لذرة شائبة في نقطة كمية Q.D تعتمد على ارتفاع حاجز الجهد، وحجم ومادة النقطة الكمية (Haus *et al.* 1993). كما تعتمد على شكل البلورة (Hens and Vanmaekelbergh 2002)، لكن يكون تأثير الشكل ثانوي بينما تأثير موقع الشائبة يكون قوي على طاقة الربط وحالة الأحتواء (Pérezet *al.* 2007).

درس بعض العلماء في السنوات القليلة الماضية تأثير الضغط الهيدروستاتيكي (Hydrostatic Pressure) على تركيب الحزمة (Band Structure) في الأنظمة ثلاثية البعد (bulk) والأنظمة واطنة الأبعاد (low dimensions) بصورة نظرية وتجريبية. كما درس (Pérezet *al.* 2007) تأثير الضغط الهيدروستاتيكي على طاقة الربط للحالة 1s للشوائب المانحة في نقاط كم GaAs باستخدام تقريب التغيرات Variational Approach. بينما درس (Moscoso *et al.* 2007) تأثير الضغط الهيدروستاتيكي على طاقة الربط للأكسايونات الضوئية Light Excitons في نقاط كم كروية (SQD) للحالة 1s باستخدام تقريب التغيرات. كما قام الباحثون (Elmeshad *et al.* 2009) بحساب طاقة ربط الأكسايونات تحت تأثير الضغط. درس الباحثون (Ikhdair *et al.* 2012) الخواص الطيفية للنقاط الكمية الأسطوانية تحت تأثير المجالات الكهربائية والمغناطيسية المنتظمة سويةً مع مجال Aharonov-Bohm.

## النموذج الحسابي:

نفرض نقطة كمية كروية (SQD) من مادة GaAs تحتوي على شوائب ضحلة تحت تأثير الضغط الهيدروستاتيكي، وباستخدام تقريب الكتلة الفعالة Effective Mass Approximation وإن الهاملتون الذي يصف هذه الحالة هو (Ferreya and Proetto 1995)

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*(p)\lambda^2} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon(p)\lambda} V(\vec{r}, \vec{r}_i) \dots\dots\dots (1)$$

حيث أن  $\vec{r}$  هو أهدائي الإلكترون ،  $\vec{r}_i$  أهدائي الشائبة ،  $\nabla^2$  مؤثر لابلاس في الإهدائيات الكروية ، إن المعامل  $\lambda$  هو ثابت مفداره  $\lambda = R/a_0^*$  حيث  $a_0^* = \epsilon \hbar^2 / m^* e^2$  نصف قطر بور المؤثر Effective Bohr Radius ،  $R$  نصف قطر النقطة الكمية . إن  $m^*(p), \epsilon(p)$  هو ثابت العزل dielectric constant والكتلة المؤثرة للإلكترون effective mass كدالة للضغط الهيدروستاتيكي V.pressurehydrostatic هو تفاعل كولوم المؤثر بين الإلكترون والمائحة والذي يأخذ الصيغة التالية لنقاط كم متجانسة  $\epsilon_1 = \epsilon_2$

$$V(\vec{r}, \vec{r}_i) = \sum_{\ell=0}^{\infty} p_{\ell}(\cos \xi) \left\{ \eta(1-r_i) \left[ \frac{r_i^{\ell}}{r_i^{\ell+1}} \right] + \eta(r_i-1) \frac{r_i^{\ell}}{r_i^{\ell+1}} \right\} \dots\dots (2)$$

حيث  $\epsilon_1, \epsilon_2$  هي ثوابت العزل الكهربائي لمادة اللب والقشرة الخارجية على الترتيب . في المعادلة  $p_{\ell}(\cos \xi)$  (2) هو متعدد حدود ليجنر للرتبة  $\ell$  ،  $\xi$  هي الزاوية بين الإلكترون والمائحة ( التي تقاس من نقطة الأصل عند مركز النقطة الكمية ) ،  $r_i$  هو البعد الأصغر بين  $r_i, r_j$  ، البعد الأكبر بين  $r_i, r_j$  ، دالة الخطوة step function .

من الهاملتون (1) يمكن ملاحظة أن الطاقة الحركية تعتمد على  $1/\lambda^2$  بينما تفاعل كولوم يعتمد على  $1/\lambda$  لذلك عندما يكون  $\lambda$  صغير فإن تفاعل كولوم سوف يعامل كحد تصحيح في نظرية التصحيح ، وإن هذا التقريب يسمى تقريب الأحتواء القوي (Strong Confinement Approach (Ferreya et al. 1997) .

إن الصيغة العامة لدالة الموجة هي :

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = N_{nl} j_{\ell}(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \dots\dots (3)$$

لغرض تحقيق الشرط  $j_{\ell}(k(r=R)) = 0$  يتم الحصول على طيف القيمة الذاتية للطاقة  $E = \frac{\hbar^2}{2m^* R^2} x_{nl}^2$  ، حيث  $N_{nl}$  هو ثابت المعايرة الذي يأخذ القيمة  $N_{nl}^2 = \frac{2}{R^3} \frac{1}{[j_{\ell+1}(x_{nl})]^2}$  ،  $j_{\ell}(kr)$  تمثل دوال بزل الكروية ،  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  هي التوافقيات الكروية ،  $x_{nl}$  هي جذور دالة بزل الكروية للرتبة  $\ell$  .

من خلال العلاقة التالية  $E^{(1)} = \langle n\ell m | V | n\ell m \rangle$  يمكن الحصول على التصحيح للرتبة الأولى ، وبذلك يمكن حساب طاقة الربط

$$E_b(R, r_i, p) = \frac{1}{\lambda^2} \frac{\hbar^2}{2m^*(p)R^2} x_{nl}^2 - \frac{1}{\lambda} E^{(1)}(R, r_i, p) \dots\dots (4)$$

يمكن أن نحسب التصحيح من المرتبة الأولى للحالات ns عندما  $r_i \leq R$

$$E_{n00}^{(1)}(R, r_i, p) = \frac{e^2}{\epsilon(p)R(p)} \left[ 1 - \frac{\sin(2\vec{r}_i)}{2\vec{r}_i} + \text{Cin}(2x_{n0}) - \text{Cin}(2\vec{r}_i) \right] \dots\dots (5)$$

$$\bar{r}_i = \frac{r_i x_{n0}}{R} \text{ حيث}$$

أما في حالة  $r_i > R$  فإن التصحيح سوف يكون

$$E_{n00}^{(1)}(r_i, p) = \frac{e^2}{\varepsilon(p)r_i} \dots\dots\dots (6)$$

وعندما تكون المانحة عند مركز النقطة الكمية  $r_i = 0$  فإن التصحيح يأخذ الصيغة التالية:

$$E_{n00}^{(1)}(R, r_i = 0, p) = \frac{e^2}{\varepsilon(p)R(p)} \text{Cin}(2x_{n0}) \dots\dots\dots (7)$$

حيث  $\text{Cin}(x)$  هي دالة تكامل (Arfken 2001) cosine(cosine integral function).

إن أنصاف الأقطار و ثوابت العزل الكهربائي والكتل المؤثرة لمادة GaAs تعطى بدلالة الضغط (Pěrezet al. 2007):

$$R(p) = R_0 (1 - 1.5082 \times 10^{-4} p) \dots\dots\dots (8)$$

$$\varepsilon(p) = 13.13 - 0.0088 p \dots\dots\dots (9)$$

$$m^*(p) = m^*(0) \exp(0.0078 p) \dots\dots\dots (10)$$

حيث  $p$  هو الضغط الذي يقاس بوحدات  $R_0, \text{kbar}$  هو نصف قطر النقطة الكمية عند  $p=0$ .

يمكن أن نجري نفس الخطوات لحساب التصحيح من الرتبة الأولى للحالات المثارة  $\ell = 1, m = 0, \pm 1$  مع افتراض أن المانحة

تتحرك على طول المحور  $Z$  أي أن  $\theta_i, \phi_i = 0$

عند الشرط  $0 \leq r_i \leq R$  فإن التصحيح للحالة (n10) هو

$$E_{n10}^{(1)}(R, r_i, p) = \frac{e^2}{\varepsilon(p)} [A(R, r_i, p) + B(R, r_i, p)] \dots\dots\dots (11)$$

حيث أن

$$A(R, r_i, p) = \frac{N_{n1}}{2a^2} (\alpha + \beta) \quad B(R, r_i, p) = \frac{4}{5} \frac{S^2}{R(p) j_2^2(x_{n1})} (\gamma + \delta)$$

$$a = \frac{x_{n1}}{R(p)} \quad , \quad S = \frac{r_i}{R(p)} \quad , \quad \alpha = 1 - \frac{2 \sin^2(\bar{r}_i)}{\bar{r}_i^2} + \frac{\sin(2\bar{r}_i)}{2\bar{r}_i}$$

$$\beta = \frac{\sin^2(\bar{r}_i)}{\bar{r}_i^2} - \frac{\sin^2(x_{n1})}{x_{n1}^2} + \frac{\sin(2x_{n1})}{x_{n1}} - \frac{\sin(2\bar{r}_i)}{\bar{r}_i} + \text{Cin}(2x_{n1}) - \text{Cin}(2\bar{r}_i)$$

$$\gamma = \frac{1}{2x_{n1}^5 S^5} \left[ \left( \frac{\bar{r}_i^2}{2} - \frac{5}{4} \right) \sin(2\bar{r}_i) + \frac{3}{2} \bar{r}_i \cos(2\bar{r}_i) + \bar{r}_i + \frac{\bar{r}_i^3}{3} \right]$$

$$\delta = \frac{1}{4} \left[ \frac{\sin^2(\bar{r}_i)}{\bar{r}_i^4} - \frac{\sin^2(x_{n1})}{x_{n1}^4} + \frac{1}{\bar{r}_i^2} - \frac{\sin(2\bar{r}_i)}{\bar{r}_i^3} + \frac{\sin(2x_{n1})}{x_{n1}^3} - \frac{1}{x_{n1}^2} \right]$$

أما عند الشرط  $r_i \geq R$  فإن التصحيح

$$E_{n10}^{(1)}(R, r_i, p) = \frac{e^2}{\varepsilon(p)} \left[ \frac{1}{r_i} + \frac{2}{5} \frac{N_{n1} W}{r_i^3} \right] \dots \dots (12)$$

حيث أن

$$W = \left( \frac{R(p)}{x_{n1}} \right)^{5/2} \left[ x_{n1} + \frac{x_{n1}^3}{3} + \left( \frac{x_{n1}^2}{2} - \frac{5}{4} \right) \sin(2x_{n1}) + \frac{3}{2} x_{n1} \cos(2x_{n1}) \right]$$

عندما يكون العدد الكمي المغناطيسي  $m = \pm 1$  أي الحالة  $(n1 \pm 1)$  فإن الأختلاف سيكون فقط في الحد الثاني من المعادلة (11)

$$B(R, r_i, p) = \frac{-2}{5} \frac{S^2}{R j_2^2(x_{n1})} (\gamma + \delta)$$

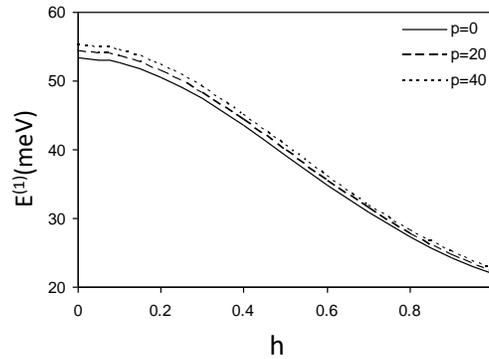
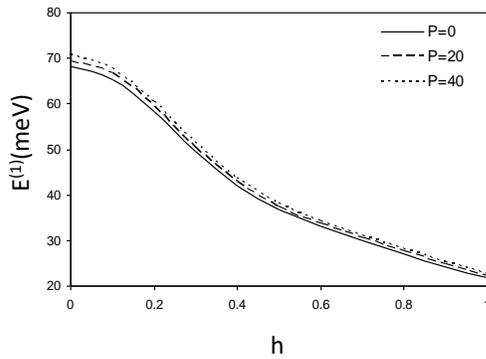
أما الحد الثاني من المعادلة (12) سوف يكون  $\left( \frac{-1}{5} \frac{N_{n1} W}{r_i^3} \right)$

ولكن عندما تكون المانحة عند مركز النقطة الكمية ( $r_i = 0$ ) فإن التصحيح يأخذ الصيغة التالية:

$$E_{n1(0,\pm 1)}^{(1)}(R, r_i, p) = \frac{N_{n1}}{2a^2} \beta(r_i = 0) \dots \dots (13)$$

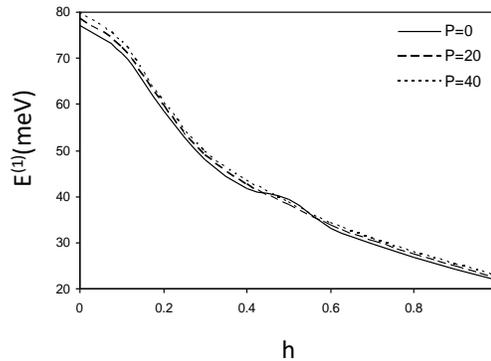
النتائج والمناقشة :

الأشكال (1,2,3) تمثل تصحيحات الطاقة للرتبة الأولى للحالات 1s,2s,3s للشوائب الضحلة Shallow Impurities في نقاط كم كروية في بئر ذات عمق لانهاضي كدالة لموقع الشائبة بنصف قطر النقطة  $R=50A^\circ$  عندما يسلط عليها ضغط هيدروستاتيكية Hydrostatic Pressure مختلفة  $p=0,20,40$  kbar، والتي تم حسابها من العلاقات (7,5)



الشكل(2): تصحيحات الطاقة من الرتبة الأولى للحالة 2s كدالة لموقع الشائبة  $h = r_i / R$  لنقاط كم كروية بنصف قطر  $R=50A^\circ$  بضغط مختلف  $p=0,20,40$ kbar

الشكل(1): تصحيحات الطاقة من الرتبة الأولى للحالة 1s كدالة لموقع الشائبة  $h = r_i / R$  لنقاط كم كروية بنصف قطر  $R=50A^\circ$  بضغط مختلف  $p=0,20,40$ kbar

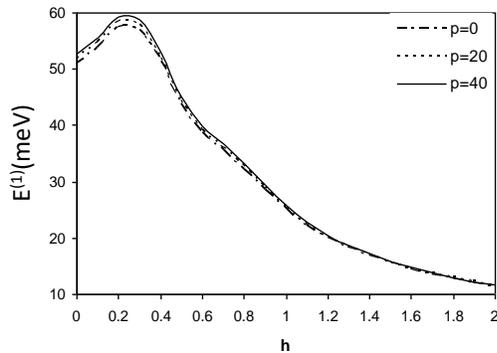


الشكل(3): تصحيحات الطاقة من الرتبة الأولى للحالة 3s كدالة لموقع الشائبة  $h = r_i / R$  لنقاط كم كروية بنصف قطر  $R=50A^\circ$  بضغط مختلف  $p=0,20,40$ kbar

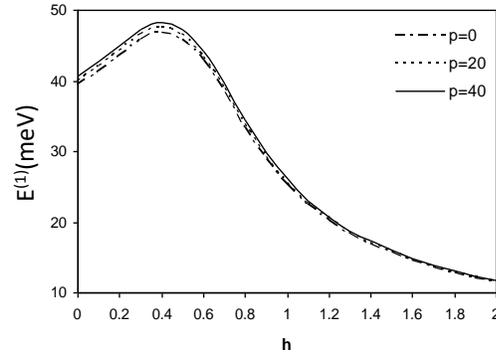
يتبين من هذه الأشكال أن تصحيحات الطاقة تقل كلما تحركت الشائبة من مركز النقطة  $r_i/R = 0$  إلى حافتها  $r_i/R = 1$  ، ويكون هذا السلوك على وتيرة واحدة بسبب التناظر الكروي للكثافة الإلكترونية للحالات ns . إن النتائج في الشكل (1) مطابقة للنتائج في المصدر (Pěrezet al. 2007). كلما ازداد الضغط المسلط ازدادت تصحيحات الطاقة، مما يسبب إحتواء إلكتروني أكبر في النظام ، وإن هذه الزيادة تعتمد على موقع الشائبة حيث يكون تأثيرها أقل ما يمكن عند حافة النقطة الكمية .

أما الأشكال (7,6,5,4) فإنها تبين تصحيحات الطاقة للرتبة الأولى للحالات  $1p^{0,\pm 1}, 2p^{0,\pm 1}$  كدالة لموقع الشائبة بنصف قطر  $R=50A^\circ$  تحت ضغوط هيدروستاتيكية مختلفة  $p=0,20,40$  ، وإن هذه النتائج تم حسابها من العلاقات (11-13) والتي تكون مطابقة للنتائج في المصدر (Ferreyra and Proetto 1995). يتضح من الأشكال (7,6) إعتداد تصحيحات الطاقة على موقع الشائبة والذي يكون على وتيرة واحدة ، كلما أبتعدت الشائبة عن مركز النقطة سوف تقل تصحيحات الطاقة وهذا ناشئ من تراكم الشحنة السالبة للحالات  $(n \pm 1)$  في المستوي x-y عندما تتحرك الشائبة على طول محور z .

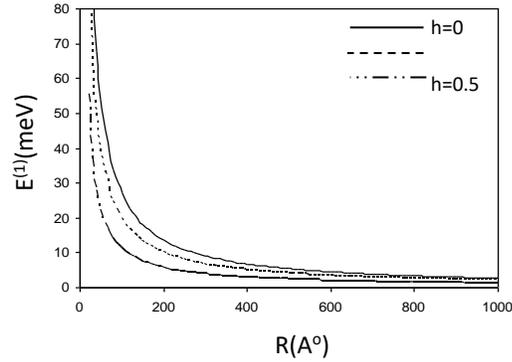
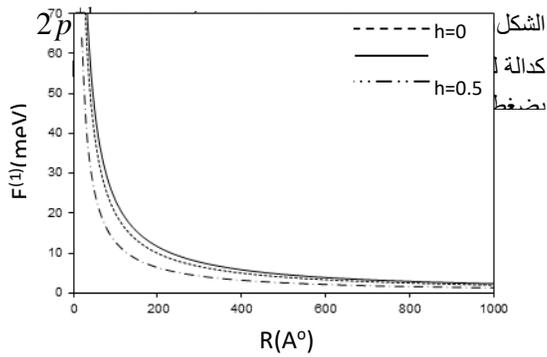
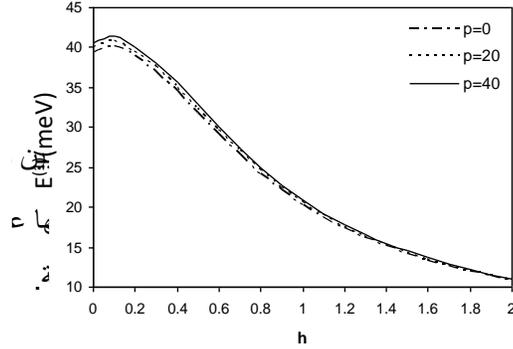
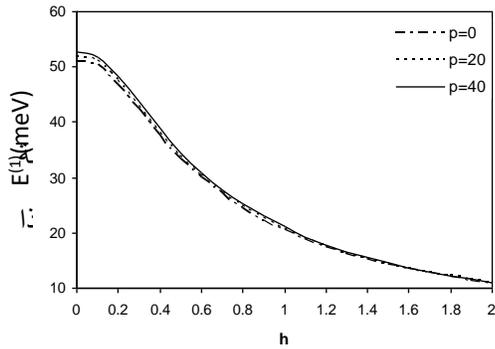
لكن في الحالات (n10) كما في الأشكال (5,4) فإن إعتداد تصحيح الطاقة على موقع الشائبة لا يكون على وتيرة واحدة، بسبب تراكم الشحنة السالبة على طول محور z الذي تتحرك عليه الشائبة، إن أعلى قيم تصلها تصحيحات الطاقة عند موقع الشائبة  $r_i/R \approx 0.5$  ، والذي ينجلي واضحاً في الشكل (9) حيث تصحيحات الطاقة كدالة لأنصاف أقطار النقاط الكمية الكروية تحت ضغط ثابت  $p=20$  kbar



الشكل(5): تصحيحات الطاقة من الرتبة الأولى للحالة  $2p^0$  كدالة لموقع الشائبة لنقاط كم كروية بنصف قطر  $R=50A^\circ$  بضغط مختلف  $p=0,20,40$  kbar



الشكل(4): تصحيحات الطاقة من الرتبة الأولى للحالة  $1p^0$  كدالة لموقع الشائبة لنقاط كم كروية بنصف قطر  $R=50A^\circ$  بضغط مختلف  $p=0,20,40$  kbar



الشكل (9): تصحيحات الطاقة من الرتبة الأولى للحالة  $1p^0$  كدالة لنصف قطر نقاط كم كروية R بضغط  $p=20\text{kbar}$  لمواقع مختلفة للشائبة  $h = r_i / R$

الشكل (8): تصحيحات الطاقة من الرتبة الأولى للحالة  $1s$  كدالة لنصف قطر نقاط كم كروية بضغط  $p=20\text{kbar}$  لمواقع مختلفة للشائبة  $h = r_i / R$

### المصادر:

- 1- Elmeshad N., Abdelhamid H., Hassanein H., Abdelmola S. and Said S., Exciton Binding Energy Dependence of Hydrostatic Pressure and Temperature inside a Cylindrical Quantum Dot. Chinese Journal of Physics 47, 92, 2009.
- 2- Ferreyra J.M. , Bosshard P. and Proetto C.R., Strong-confinement approach for impurities in parabolic quantum dots. Phys. Rev. B 55, 13682, 1997.
- 3- Ferreyra J.M. and Proetto C.R., Strong-confinement approach for impurities in quantum dots. Phys. Rev. B 52, 2309, 1995.
- 4- G.Arffen, Mathematical Methods for Physicists. 5<sup>rd</sup>ed. Academic Press,Inc.,2001.

- 
- 5- Haus J.W., Zhou H.S., Honma I. and Komiyama H., Quantum confinement in semiconductor heterostructure nanometer-size particles. *Phys. Rev. B* 47, 1359, 1993.
  - 6- Hens Z., Vanmaekelbergh D., Stoffels E. and Van K. H., Effects of crystal shape on the energy levels of zero-dimensional PbS quantum dots. *Phys. Rev. Lett.* 88, 236803, 2002.
  - 7- Hsieh C.Y., Lower lying states of hydrogenic impurity in a multi-layer quantum dot. *Chinese Journal of Physics* 38, 478, 2000.
  - 8- Ikhdair S. M., Hamzavi M. and Sever R., Spectra of cylindrical quantum dots: The effect of electrical and magnetic fields together with AB flux field. *Physica B* 407, 4523–4529, 2012.
  - 9- Karimi M.J., Rezaei G. and Nazari M., Linear and nonlinear optical properties of multilayered spherical quantum dots: Effects of geometrical size, hydrogenic impurity, hydrostatic pressure and temperature. *Journal of Luminescence* 145, 55–60, 2014.
  - 10- Moscoso C.A., Franco R. and Silva J., The binding energy of light excitons in spherical quantum dots under hydrostatic pressure. *Revista Mexicana* 53, 189, 2007.
  - 11- Pérez S.T., Bolívar L.E. and Revista J.S., The binding energy of donor impurities in GaAs quantum dots under the pressure effect. *Mexicana De Fisica*, 53470, 2007.
  - 12- Zhu J.L., Xiong J.J. and Gu B.L., Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. *Phys. Rev. B* 41, 6001, 1990.
  - 13- Zhu J.L., Exact solutions for hydrogenic donor states in a spherically rectangular quantum well. *Phys. Rev. B* 39, 8780, 1989.