

## تأثیر میدان مغناطیسی بر خواص الکترونیکی نقطه‌ی کوانتومی سه‌موی

نسرین دخت باطنی پور<sup>۱</sup> کامیار ثقفی<sup>۲</sup> محمد کاظم مروج فرشی<sup>۳</sup>

۱- دانش آموخته- دانشکده فنی و مهندسی- واحد علوم و تحقیقات - دانشگاه آزاد اسلامی- تهران- ایران  
[batenipour\\_nd@srbiau.ac.ir](mailto:batenipour_nd@srbiau.ac.ir)

۲- استادیار گروه الکترونیک- دانشکده فنی و مهندسی - دانشگاه شاهد - تهران- ایران  
[saghafi@shahed.ac.ir](mailto:saghafi@shahed.ac.ir)

۳- استاد گروه الکترونیک- دانشکده فنی و مهندسی - دانشگاه تربیت مدرس - تهران- ایران  
[farshi\\_k@modares.ac.ir](mailto:farshi_k@modares.ac.ir)

**چکیده:** در این مقاله، با استفاده از روش انتگرال مسیر مونت کارلو، انرژی نقطه‌ی کوانتومی سه‌موی در شرایط مختلف را محاسبه کرده و چگالی الکترون را به دست آورده‌ایم. نقش پارامترهایی مانند دما، تعداد الکترون‌های محصور شده در نقطه‌ی کوانتومی و برهم‌کنش الکترون‌ها بر انرژی پایه‌ی نقطه‌ی کوانتومی را بررسی و چگونگی تشکیل مولکول ویگنر را تشریح کرده‌ایم. همچنین تأثیر میدان مغناطیسی بر انرژی نقطه کوانتومی و نقش آن در افزایش فاصله بین سطوح انرژی را به طور ویژه بررسی کرده‌ایم.

**کلمات کلیدی:** انتگرال مسیر مونت کارلو، مولکول ویگنر، نقطه‌ی کوانتومی سه‌موی، نوسان گر هماهنگ

تاریخ ارسال مقاله : ۱۳۸۷/۷/۲۴

تاریخ پذیرش مقاله : ۱۳۸۸/۱۲/۸

نام نویسنده‌ی مسئول : دکتر کامیار ثقفی

نشانی نویسنده‌ی مسئول : ایران - تهران - دانشگاه شاهد - گروه الکترونیک - کد پستی ۳۳۱۹۱۱۸۶۵۱

حاوی ۱ تا ۲۰ الکترون و وابستگی انرژی آن‌ها به دما از جمله نتایج شبیه‌سازی است. به دست آوردن چگالی احتمال الکترون و توصیف لایه‌های انرژی و چگونگی پر شدن آن‌ها و همچنین بررسی اثر میدان مغناطیسی بر سطوح انرژی سیستم، از دیگر موارد مطرح شده در این مقاله است که در بخش سوم به تفصیل بررسی می‌شود.

## ۲- الگوی نقطه‌ی کوانتومی

نقطه‌ی کوانتومی با  $N$  الکترون، در واقع یک سیستم  $N$  ذره‌ای است که می‌توان آن را با همیلتونی (۱) الگوسازی کرد:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_i^2 + V(r_i) \right] + \sum_{j<i}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_s\epsilon_0|r_i-r_j|} \quad (1)$$

که  $m^*$  جرم موثر الکترون،  $\epsilon_0$  و  $\epsilon_s$  به ترتیب ضریب عایقی خلاء و ضریب نسبی ماده زمینه،  $e$  بار الکتریکی الکترون،  $r_i$  موقعیت مکانی الکترون  $i$  ام و  $|r_i-r_j|$  فاصله مکانی بین الکترون  $i$  ام و  $j$  ام است. عبارت‌های اول و دوم داخل کروشه‌ی رابطه‌ی (۱) به ترتیب انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل الکترون  $i$  ام اند. درحالی‌که، عبارت آخر سمت راست این رابطه نمایانگر پتانسیل برهم‌کنش بین الکترون‌ها است [8]. انرژی پتانسیل محصورکننده‌ی یک 2D-PQD در صفحه‌ی  $x$ - $y$  عبارت است از:

$$V(r_i) = \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 r_i^2 \quad (2)$$

که در واقع پتانسیل نوسان‌ساز هماهنگ با فرکانس نوسان  $\omega_0$  است. برای سادگی محاسبات از دستگاه واحدهای اتمی (au) استفاده می‌کنیم که در آن مقادیر جرم و بار الکترون آزاد،  $\hbar$  و  $4\pi\epsilon_0$  همگی برابر با یک اند، واحد سنجش انرژی برحسب  $\hbar\omega_0$  (یعنی انرژی نوسان) و واحد سنجش طول برحسب  $l_0 = \sqrt{\hbar/m^* \omega_0}$  (یعنی طول نوسان) در نظر گرفته می‌شود. در این دستگاه می‌توان همیلتونی الگو را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[ -\nabla_i^2 + \frac{1}{2} r_i^2 \right] + \sum_{j<i}^N \frac{\lambda}{|r_i-r_j|} \quad (3)$$

که ضریب تزویج  $\lambda = l_0/a_B^*$ ، قدرت برهم‌کنش الکترون‌ها را تعیین می‌کند، و در آن  $a_B^*$  اندازه‌ی موثر شعاع بوهر<sup>۱</sup> در ماده است [1]. در نقطه‌های کوانتومی نوعا  $\hbar\omega_0 \sim 0.2-6 \text{ meV}$  است. اندازه‌ی  $\lambda$  نیز به نوع پتانسیل نقطه‌ی کوانتومی محصورکننده و ماده‌ی تشکیل دهنده‌ی آن بستگی دارد. به عنوان نمونه در یک نقطه‌ی کوانتومی سهموی از جنس GaAs،  $\hbar\omega_0 = 3 \text{ meV}$  و  $\lambda = 2$  است.

هرقدر قدرت تحدید و در نتیجه اندازه‌ی  $\hbar\omega_0$  بیشتر باشد، الکترون‌ها در فضایی کوچکتر محصور می‌شوند و اندازه نقطه‌ی کوانتومی کوچکتر می‌شود. از سوی دیگر، هرقدر  $\lambda$  بزرگتر باشد برهم‌کنش الکترون‌ها بیشتر است و در نتیجه الکترون‌ها از یکدیگر

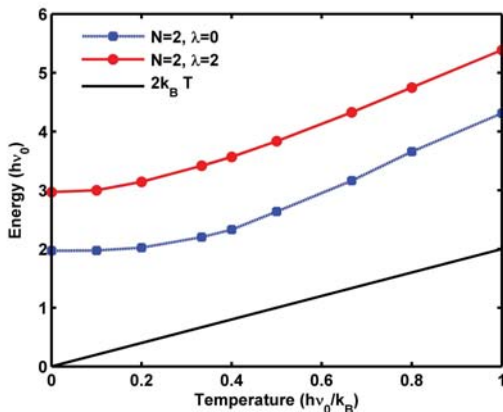
نقطه‌ی کوانتومی، نانوساختاری است که در آن تعداد محدودی الکترون در یک پتانسیل سه بعدی محصور شده‌اند، به گونه‌ای که حرکت الکترون‌ها در هر سه بعد محدود می‌شود. پتانسیل محصورکننده‌ی نقطه‌ی کوانتومی نقش پتانسیل هسته در اتم را ایفا می‌کند. خواص الکترونیکی نقطه‌ی کوانتومی بسیار شبیه اتم است. روش‌هایی نظیر کنترل تعداد الکترون‌ها، طراحی شکل و تغییر نوع و ترکیب مواد سازنده امکان تنظیم ویژگی‌های نقطه‌ی کوانتومی را به نحو مطلوب فراهم می‌کند. بدین ترتیب نقطه‌ی کوانتومی را می‌توان اتم مصنوعی تصور کرد [1]. نقطه‌ی کوانتومی یک سیستم چند ذره‌ای است که حالت‌های آن پاسخ معادله شرودینگر چندبعدی است. حل مسایل چندبعدی اساساً دشوار و نیازمند تقریب‌ها و فرضیات ساده‌کننده‌ای است که دقت محاسبات و حتی در برخی موارد اعتبار نتایج را کاهش می‌دهند. روش‌هایی نظیر هارتری-فوک (HF<sup>۱</sup>) [2,3]، تئوری تابع چگالی (DFT<sup>۲</sup>) [4] و مونت-کارلوی کوانتومی (QMC<sup>۳</sup>) [5] ابزارهای متداولی برای تحلیل نقطه‌های کوانتومی اند. با استفاده از روش‌های QMC که بر اساس نمونه‌گیری تصادفی کار می‌کنند، می‌توان معادله‌ی چندبعدی را به طور مستقیم حل کرد. در این روش‌ها برهم‌کنش بین ذرات نیز در نظر گرفته می‌شود. این امر باعث می‌شود تا بتوان اثر همپوشانی الکترونی و نقش پتانسیل محصورکننده را با دقت قابل قبول بررسی کرد.

پتانسیل محصورکننده را می‌توان با توجه به شکل و نوع نقطه‌ی کوانتومی با روابط مختلف مدل نمود. در بسیاری از موارد بویژه نقاط کوانتومی افقی<sup>۴</sup>، پتانسیل سهموی مدل مناسبی است که از آن به عنوان نقطه‌ی کوانتومی سهموی (PQD<sup>۵</sup>) تعبیر می‌شود. در نقاط کوانتومی افقی محدودیت حرکت الکترون در راستای عمودی  $z$  بسیار شدیدتر از دو امتداد دیگر است. لذا از حرکت الکترون در راستای  $z$  صرف نظر می‌شود و نقطه‌ی کوانتومی سهموی دو بعدی (2D-PQD<sup>۶</sup>) در صفحه‌ی  $x$ - $y$  مدل می‌شود.

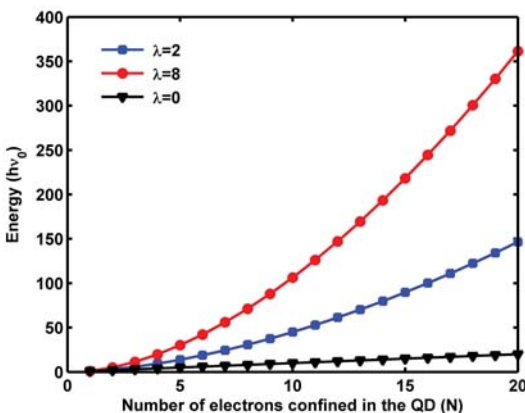
بررسی اثر میدان مغناطیسی بر انرژی اکسایتون<sup>۷</sup> در PQD با روش تحلیلی نشان می‌دهد انرژی اکسایتون در حضور میدان مغناطیسی افزایش می‌یابد [6]. روش تحلیلی بکار رفته برای تعداد ذرات کم معتبر است و با افزایش تعداد ذرات که در آن برهم‌کنش بین الکترون‌ها و همپوشانی الکترونی اهمیت می‌یابد، این روش دقت کافی ندارد. از جمله روش‌هایی که با دقت زیاد برهم‌کنش الکترون‌ها را لحاظ می‌کند روش انتگرال مسیر مونت کارلو (PIMC<sup>۸</sup>) است، که یکی از روش‌های QMC می‌باشد [7]. در این مقاله ساختار الکترونی نقطه‌ی کوانتومی سهموی دو بعدی را با استفاده از روش انتگرال مسیر مونت کارلو محاسبه می‌کنیم و تاثیر میدان مغناطیسی را بر این ساختار بررسی می‌نماییم. در بخش دوم این مقاله الگوی نقطه‌ی کوانتومی به کار رفته را شرح می‌دهیم. محاسبه انرژی حالت پایه برای یک نقطه‌ی کوانتومی

$(\lambda=0)$ ، در حضور برهم کنش ضعیف ( $\lambda=2$ ) و در حضور برهم کنش نسبتاً قوی ( $\lambda=8$ ) و در دمای  $T=0.04(\hbar\omega_0/k_B)$  انجام شده است.

در غیاب برهم کنش، با افزایش تعداد الکترون‌ها، انرژی سیستم به صورت خطی افزایش می‌یابد. در این حالت، چون تنها پتانسیل تأثیرگذار پتانسیل نوسانگر هماهنگ است، احتمال حضور الکترون در مبدا مختصات بیشینه است و هرچه از مبدا دور شویم این احتمال کاهش می‌یابد. اما در حضور برهم کنش، علاوه بر پتانسیل هارمونیک، پتانسیل کولنی نیز در توزیع الکترون‌ها نقش دارد و باعث پراکندگی توزیع آن‌ها از یکدیگر می‌شود. در این حالت با افزودن هر الکترون به نقطه‌ی کوانتومی برهم کنش افزایش می‌یابد و الکترون‌ها پراکنده‌تر می‌شوند و انرژی پتانسیل بیشتری کسب می‌کنند. با افزایش تعداد الکترون‌ها به سیستم انرژی کل آن به صورت غیر خطی افزایش می‌یابد. هرچه شدت برهم کنش قویتر ( $\lambda$  بزرگتر) باشد، پراکندگی الکترون‌ها و در نتیجه انرژی کل سیستم بیشتر می‌شود.



شکل (۱): نمودار انرژی کل یک نقطه‌ی کوانتومی دو الکترونی ( $N=2$ ) بر حسب دما برای دو حالت با  $\lambda=0$  و  $\lambda=2$  خط ممتد حد کلاسیک  $E=2k_B T$  را نشان می‌دهد.



شکل (۲): نمودار انرژی کل نقطه‌ی کوانتومی بر حسب تعداد الکترون‌های محصور در آن برای سه حالت با  $\lambda=0$ ،  $\lambda=2$  و  $\lambda=8$  در دمای  $T=0.04(\hbar\omega_0/k_B)$

فاصله بیشتری می‌گیرند و در فضای نقطه‌ی کوانتومی پراکنده می‌شوند. در نهایت الکترون‌ها در نقطه‌ی کوانتومی به‌گونه‌ای توزیع می‌شوند که این دو عامل به تعادل برسند و انرژی سیستم کمینه شود. اگر نقطه‌ی کوانتومی در یک میدان مغناطیسی ثابت،  $B_0$ ، قرار گیرد، یک نیروی لورنتسی در راستای عمود بر صفحه‌ی  $r-B_0$  بر الکترون‌های در حال حرکت وارد می‌شود. این نیرو موجب می‌شود الکترون‌ها با فرکانس زاویه‌ای ثابت  $\omega_c = eB_0/m^*$  حرکت چرخشی داشته باشند. اثر میدان مغناطیسی در همیلتونی با پتانسیل برداری  $A$  لحاظ می‌شود. در این حالت همیلتونی سیستم بدون در نظر گرفتن برهم کنش الکترون‌ها به صورت رابطه (۴) نوشته می‌شود [9]:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2m^*} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla_i + eA \right)^2 + V(r_i) \right] \quad (4)$$

با در نظر گرفتن جابجایی در صفحه  $x-y$  و میدان مغناطیسی در راستای  $z$ ، همیلتونی در غیاب اثر زمین  $^{11}$  به شکل زیر تبدیل می‌شود:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_i^2 + V(r_i) + \frac{e^2}{8m^*} (B \times r_i)^2 \right] \quad (5)$$

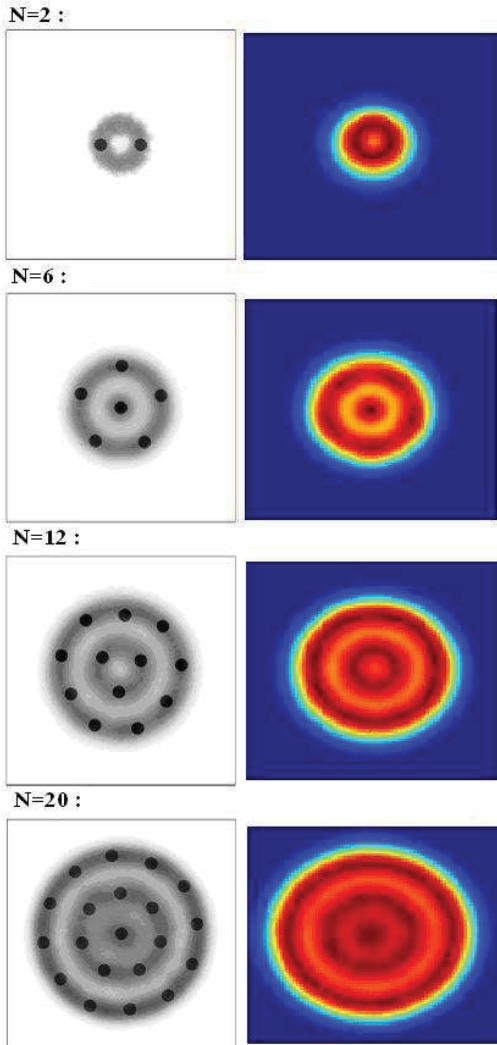
$$= \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_i^2 + V(r_i) + \frac{1}{2} m^* \left( \frac{\omega_c}{2} \right)^2 r_i^2 \right]$$

برای یک 2D-PQD با پتانسیل داده شده در رابطه‌ی (۲)، فرکانس نوسان کل برابر با  $\omega_H = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2/4}$  است. در ادامه با توجه به همیلتونی‌های روابط (۳) و (۵)، رفتار یک 2D-PQD با ابعاد ثابت را بررسی می‌کنیم. محاسبات با استفاده از روش PIMC و تخمینگر وریال  $^{12}$  برای محاسبه‌ی انرژی انجام می‌شود.

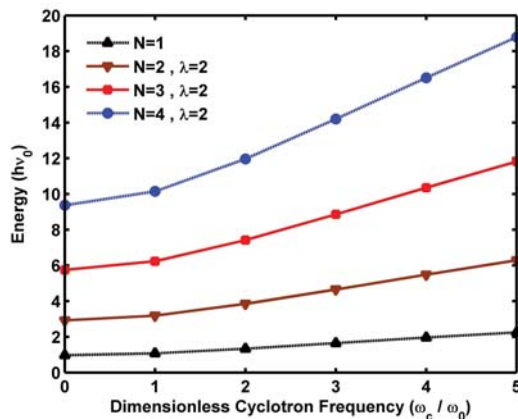
### ۳- نتایج شبیه‌سازی

با افزایش دما، نقاط کوانتومی به تدریج مانند سیستم‌های کلاسیک رفتار می‌کنند. شکل (۱) این مطلب را نشان می‌دهد. در این شکل انرژی کل نقطه‌ی کوانتومی حاوی دو الکترون ( $N=2$ ) برای دو حالت یکی در غیاب برهم کنش الکترون‌ها ( $\lambda=0$ ) و دیگری در حضور برهم کنشی نسبتاً ضعیف ( $\lambda=2$ ) بر حسب دما ( $T \equiv \hbar\omega_0/k_B$ ) نشان داده شده است. برای مقایسه، خط  $E=2k_B T$  که تابعیت انرژی از دما برای حالت کلاسیک را بیان می‌کند، نیز رسم شده است. همانگونه که ملاحظه می‌شود به علت وابستگی انرژی جنبشی به دما، با افزایش دما انرژی کل سیستم با شیب تقریباً ثابت (مشابه حد کلاسیک) افزایش می‌یابد. در حالیکه، در دماهای کم شیب افزایش انرژی بر حسب دما اندک (تقریباً مستقل از دما) است.

بیشینه‌ی تعداد الکترون‌هایی را که می‌توان در یک نقطه‌ی کوانتومی محصور نمود، به اندازه آن بستگی دارد. با وارد شدن هر الکترون به نقطه‌ی کوانتومی بر انرژی کل آن افزوده می‌شود. شکل (۲) انرژی کل نقطه‌ی کوانتومی بر حسب تعداد الکترون ( $N$ )‌های وارد شده به آن را نشان می‌دهد. محاسبات برای انرژی سه حالت در غیاب برهم کنش



شکل (۳): چگالی الکترونی در مدل کلاسیک [10] (چپ) و مدل حاصل از شبیه‌سازی در این مقاله (راست) برای  $N=2, 6, 12, 20$  و با فرض  $\lambda=8$ .



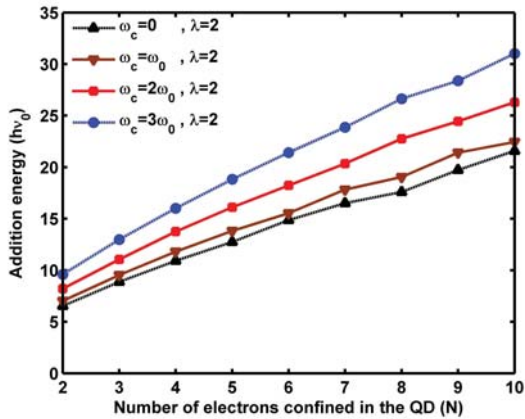
شکل (۴): نمودار انرژی کل نقطه‌ی کوانتومی برحسب  $\omega_c/\omega_0$  برای چهار حالت ( $N=1; \lambda=0$ ) و ( $N=2, 3, 4; \lambda=2$ ).

هرگاه شدت برهم‌کنش در یک PQD در مقایسه با پتانسیل محصورکننده‌ی نقطه‌ی ضعیف باشد، متوسط فاصله الکترون‌ها کم و در نتیجه چگالی آن‌ها زیاد می‌شود. اما در حضور یک برهم‌کنش قوی، متوسط فاصله الکترون‌ها افزایش و چگالی آن‌ها کاهش می‌یابد. در حالت اخیر، انرژی جنبشی الکترون‌ها در مقایسه با برهم‌کنش کولنی ناچیز است و در نتیجه آن‌ها در پوسته‌هایی به مرکزیت مبدأ مختصات آرایش می‌یابند. به‌علت شباهت زیاد این ساختار منظم با الگوی بلور ویگنر، آن را مولکول ویگنر<sup>۱۳</sup> می‌نامند [1]. بدانوف<sup>۱۴</sup> و پیترز<sup>۱۵</sup> نحوه‌ی شکل‌گیری این پوسته‌ها را با استفاده از روش کلاسیک بررسی و گزارش کرده‌اند [10]. طبق این گزارش برای  $N < 6$  یک پوسته تشکیل می‌شود ولی با ورود الکترون ششم پوسته دوم ظاهر می‌شود و الکترون‌ها به‌صورت ترکیب ۱-۵ قرار می‌گیرند. ترکیب دو پوسته‌ای تا  $N < 16$  ادامه دارد. با ورود الکترون شانزدهم پوسته سوم نیز تشکیل می‌شود (ترکیب ۱-۵-۱۰).

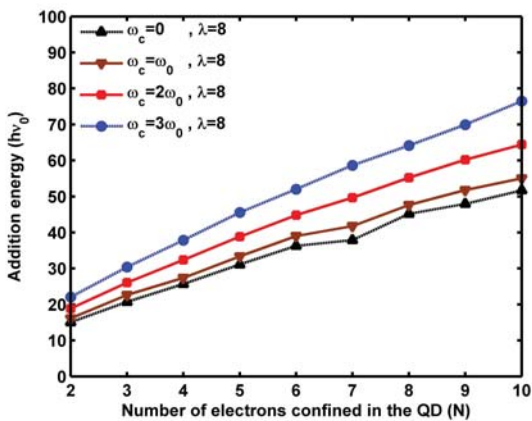
در این شبیه‌سازی چگالی الکترون و چگونگی تشکیل پوسته‌ها را برای  $N=2, 6, 12, 20$  و با فرض  $\lambda=8$  بررسی کرده‌ایم. در شکل (۳) نتایج حاصل از این شبیه‌سازی در سمت راست نمایش داده شده و با نتایج حاصل از روش کلاسیک پیش‌گفته (سمت چپ) مقایسه شده است.

هنگامی که یک نقطه‌ی کوانتومی در یک میدان مغناطیسی قرار گیرد، انرژی حالت پایه‌ی آن تغییر می‌کند. بنابراین با اعمال میدان مغناطیسی می‌توان انتقال حامل را کنترل کرد. شکل (۴) انرژی کل یک نقطه‌ی کوانتومی در حضور میدان مغناطیسی را برحسب فرکانس چرخش بهنجار شده‌ی الکترون‌ها،  $\omega_c/\omega_0$ ، نشان می‌دهد. انرژی برای چهار حالت ( $N=1; \lambda=0$ ) و ( $N=2, 3, 4; \lambda=2$ ) در دمای چهار حالت  $T=0.04 (\hbar\omega_0/k_B)$  محاسبه شده است. همانگونه که ملاحظه می‌شود با افزایش میدان و در نتیجه افزایش فرکانس چرخش، انرژی کل افزایش می‌یابد. این افزایش برای  $\omega_c > \omega_0$  کاملاً مشهود است. با افزایش  $N$  شیب منحنی نیز افزایش می‌یابد. بنابراین هرچه تعداد الکترون‌های داخل نقطه‌ی کوانتومی بیشتر باشد اثر میدان نیز بیشتر است.

شکل (۵) اثر میدان را در حالت برهم‌کنش قوی نشان می‌دهد. در این شکل نیز رفتاری مشابه شکل (۴) مشاهده می‌شود. به‌طوریکه وجود میدان مغناطیسی موجب افزایش انرژی می‌شود. نمودار تغییرات انرژی برای  $N=1$  با شکل (۴) یکسان است ولی با افزایش تعداد الکترون‌ها اثر برهم‌کنش قوی ظاهر می‌شود و انرژی الکترون افزایش می‌یابد. این افزایش انرژی در حضور میدان مغناطیسی به نوبه خود تقویت می‌شود. بدون اعمال میدان، انرژی الکترون برای  $N=4$  و  $\lambda=2$  تقریباً برابر است با  $9.37 (\hbar\omega_0)$  که برای  $\lambda=8$  به مقدار دوبرابر یعنی  $19.57 (\hbar\omega_0)$  افزایش می‌یابد. در صورتیکه با اعمال میدانی متناظر با  $\omega_c=5\omega_0$ ، انرژی الکترون برای  $N=4$  و  $\lambda=2, 8$ ، به ترتیب  $18.79 (\hbar\omega_0)$  و  $37.40 (\hbar\omega_0)$  است که حدود دو برابر حالت اولیه است.



شکل (۶): نمودار انرژی افزایشی نقطه‌ای کوانتومی بر حسب  $N$  برای چهار حالت  $(\omega_c=0, \omega_0, 2\omega_0, 3\omega_0; \lambda=2)$ .

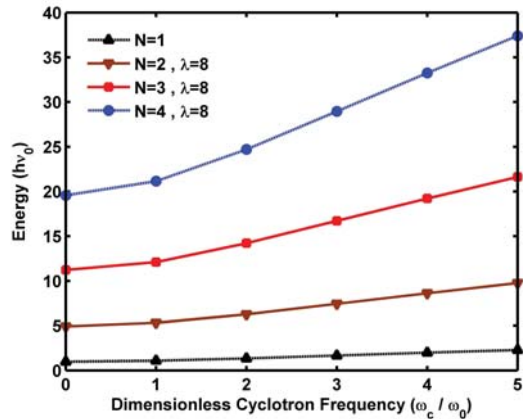


شکل (۷): نمودار انرژی افزایشی نقطه‌ای کوانتومی بر حسب  $N$  برای چهار حالت  $(\omega_c=0, \omega_0, 2\omega_0, 3\omega_0; \lambda=8)$ .

همانگونه که ملاحظه گردید، اعمال میدان مغناطیسی باعث افزایش انرژی و همچنین فاصله بین سطوح انرژی می‌شود. برای کاهش انرژی و فاصله بین سطوح آن می‌توان اندازه نقطه‌ای کوانتومی را افزایش داد. با افزایش اندازه نقطه‌ای کوانتومی، الکترونها محصور در آن با فاصله بیشتری از یکدیگر قرار می‌گیرند، به عبارتی برهم کنش بین الکترونها تضعیف می‌شود و سطوح انرژی در مقایسه با حالت برهم کنش قوی کاهش می‌یابند.

#### ۴- نتیجه‌گیری

در این مقاله ویژگی‌های نقطه‌ای کوانتومی سه‌موی (PQD) را با روش PIMC مطالعه کرده‌ایم. در این مطالعه نشان داده‌ایم که با افزایش دما رفتار سیستم از حالت کوانتومی به کلاسیک تبدیل می‌شود و با افزودن هر الکترون به نقطه‌ای کوانتومی انرژی کل آن افزایش می‌یابد. رقابت پتانسیل محصورکننده و برهم‌کنش الکترونی را بررسی و چگونگی تشکیل مولکول ویگنر و آرایش پوسته‌های الکترونی را نیز تشریح کرده‌ایم. چگالی الکترون را برای نقطه‌های کوانتومی حاوی ۱ تا ۲۰ الکترون به‌دست آورده‌ایم و با نتایج حاصل از مدل کلاسیک مقایسه



شکل (۸): نمودار انرژی کل نقطه‌ای کوانتومی بر حسب  $\omega_c/\omega_0$  برای چهار حالت  $(N=1; \lambda=0)$  و  $(N=2, 3, 4; \lambda=8)$ .

همانگونه که ملاحظه شد، انرژی نقطه‌ای کوانتومی با افزودن الکترون افزایش می‌یابد. اگر انرژی کل نقطه‌ای کوانتومی حاوی  $N$  الکترون را با  $U(N)$  نشان دهیم، انرژی لازم برای اضافه کردن الکترون  $N$  ام را پتانسیل الکتروشمیایی می‌نامند که از رابطه زیر بدست می‌آید و از آن به عنوان سطوح انرژی نقطه‌ای کوانتومی تعبیر می‌شود [11].

$$\mu(N) = U(N) - U(N-1) \quad (6)$$

برای ارزیابی خصوصیات الکترونیکی نقطه‌ای کوانتومی از پارامتری بنام انرژی افزایشی<sup>۱۶</sup> استفاده می‌شود که انرژی لازم برای تحریک الکترون از بالاترین سطح انرژی اشغال شده به پایین‌ترین سطح انرژی خالی می‌باشد [12,11].

$$\Delta A(N) = \mu(N+1) - \mu(N) = U(N+1) + U(N-1) - 2U(N) \quad (7)$$

شکل‌های (۶) و (۷) انرژی افزایشی نقطه‌ای کوانتومی را به ترتیب برای حالت‌های برهم‌کنش ضعیف و قوی نشان می‌دهند. در هر حالت انرژی افزایشی در غیاب میدان مغناطیسی ( $\omega_c=0$ ) و در حضور آن با شدت‌های مختلف ( $\omega_c=\omega_0, 2\omega_0, 3\omega_0$ ) رسم شده‌است. ملاحظه می‌شود که در نقطه‌ای کوانتومی سه‌موی با افزایش تعداد الکترون‌ها، انرژی افزایشی زیاد می‌شود. همچنین وجود میدان موجب افزایش این انرژی می‌شود. از مقایسه شکل‌های (۶) و (۷) استنباط می‌شود که انرژی افزایشی در حالت برهم‌کنش قوی بیش از دو برابر حالت برهم‌کنش ضعیف است. به عبارت دیگر فاصله بین سطوح انرژی بیشتر است و برای تحریک الکترون به سطح بالاتر انرژی بیشتری لازم است. در غیاب میدان، انرژی افزایشی برای  $N=10$  در حالت  $\lambda=2$  و  $\lambda=8$  به ترتیب برابر با  $21.58(\hbar\omega_0)$  و  $51.71(\hbar\omega_0)$  است. در حالیکه در حضور میدانی متناسب با  $\omega_c=3\omega_0$ ، انرژی افزایشی حدود ۱.۵ برابر می‌شود. بنابراین با استفاده از میدان مغناطیسی می‌توان فاصله بین سطوح انرژی را کنترل و خواص الکترونیکی نقطه‌ای کوانتومی را به نحو مطلوبی تنظیم کرد.



## زیر نویس ها

- <sup>1</sup> Hartree-Fock (HF)
- <sup>2</sup> density functional theory (DFT)
- <sup>3</sup> quantum Monte Carlo (QMC)
- <sup>4</sup> lateral quantum dot
- <sup>5</sup> parabolic quantum dot (PQD)
- <sup>6</sup> two dimensional parabolic quantum dot (2D-PQD)
- <sup>7</sup> exciton
- <sup>8</sup> path integral Monte Carlo (PIMC)
- <sup>9</sup> atomic units
- <sup>10</sup> effective Bohr radius
- <sup>11</sup> Zeeman
- <sup>12</sup> Virial estimator
- <sup>13</sup> Wigner
- <sup>14</sup> Bedanov
- <sup>15</sup> Peeters
- <sup>16</sup> addition energy

کرده ایم. همچنین اثر میدان مغناطیسی را بررسی کرده و نشان داده ایم که با اعمال میدان مغناطیسی انرژی کل نقطه کوانتومی و فاصله بین سطوح انرژی الکترونی افزایش می یابد. بنابراین می توان از میدان مغناطیسی به عنوان ابزاری برای کنترل فاصله بین سطوح انرژی و تنظیم خصوصیات الکترونیکی نقطه کوانتومی استفاده کرد.

## مراجع

- [1] Reusch B., *Quantum Simulations for Semiconductor Quantum Dots: From Artificial Atoms to Wigner Molecules*, PHD dissertation, Heinrich-Heine-University, Düsseldorf, Germany, March 2003.
- [2] Sundqvist P. A., Volkov S. Yu., Lozovik Yu. E. and Willander M., "Phase Transitions of a few-electron System in a Spherical Quantum Dot", *Phys. Rev. B*, Vol. 66, pp. 075335:1-10, 2002.
- [3] Reusch B., Hausler W. and Grabert H., "Wigner molecules in quantum dots", *Phys. Rev. B*, Vol. 63, pp. 113313-6, 2001.
- [4] Rasanen E., Saarikoski H., Stavrou V. N., Harju A., Puska M. J. and Nieminen R. M., "Electronic Structure of Rectangular Quantum Dots", *Phys. Rev. B*, Vol. 67, pp. 235307: 1-8, 2003.
- [5] Egger R., Hausler W., Mak C. H. and Grabert H., "Crossover from Fermi Liquid to Wigner Molecule Behavior in Quantum Dots", *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 82, pp. 3320-3323, 1999.
- [6] Jaziri S. and Bennaceur R., "Excitons in parabolic quantum dots in electric and magnetic fields", *Semicond. Sci. Technol.*, Vol. 9, pp. 1775-1780, 1994.
- [7] Kent P., *Techniques and Applications of Quantum Monte Carlo*, PHD dissertation, University of Cambridge, England, August 1999.
- [8] Shumway J. and Ceperley D. M., "Quantum Monte Carlo Methods in the Study of Nanostructures", in *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology*, edited by Rieth M. and Schommers W., Vol. 3: pp. 605-641, American Scientific Publishers, 2006.
- [9] Singh J., *Quantum Mechanics: Fundamentals and Applications to technology*, John Wiley & Sons, pp. 424-473, 1997.
- [10] Bedanov V. M. and Peeters F. M., "Ordering and Phase Transitions of Charged Particles in a Classical Finite Two-dimensional System", *Phys. Rev. B*, Vol. 49, No. 4, pp. 2667-2676, 1994.
- [11] Kouwenhoven L.P., Marcus C.M., McEuen P.L., Tarucha S., Westervelt R.M., and Wingreen N.S., "Electron transport in quantum dots", *Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on Mesoscopic Electron Transport*, edited by Sohn L.L., Kouwenhoven L.P., and Schön G., Kluwer Academic Publishers, pp. 105-214, 1997.
- [12] Sahin M. and Tomak M., "Electronic structure of a many-electron spherical quantum dot with an impurity", *Phys. Rev. B*, vol. 72, pp. 125323-1:6, 2005.

