



MÔ PHỎNG TRẠNG THÁI ĐIỆN TỬ VÀ PHỔ HẤP THỤ CỦA CÁC CHẤM LƯỢNG TỬ CÓ HÌNH DẠNG KHÁC NHAU

Nguyễn Thành Tiên và Phạm Thanh Dũng

Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Cần Thơ

Thông tin chung:

Ngày nhận: 09/06/2016

Ngày chấp nhận: 22/12/2016

Title:

A simulation of the electronic state and the absorption of the different confinement shape quantum dots

Từ khóa:

Mô phỏng, chấm lượng tử, sự hấp thụ quang, hiệu ứng lượng tử, trạng thái điện tử

Keywords:

Simulation, Quantum Dot, Optical absorption, Quantum effect, Electronic state

ABSTRACT

We report the simulation results which compute the quantum mechanical “particle in a box” problem for a variety of different confinement shapes, such as boxes, domes, and pyramids. They are considered as the quantum dots. We explored the energy spectrum, optical absorption and orbital shapes of quantized states for the semiconductor quantum dots. From simulation data, we figured out the quantum effects in the real semiconductor material systems. The results show that, the different confinement shapes have strong effect to on the optical absorption of the semiconductor quantum dots.

TÓM TẮT

Bài báo thể hiện kết quả mô phỏng bài toán cơ học lượng tử “hạt chuyển động trong hộp kín” với các vật liệu và hình dạng hạt khác nhau như: hình hộp lập phương, hình vòm và kim tự tháp. Chúng được xem như các chấm lượng tử. Nghiên cứu đã mô phỏng phổ năng lượng, phổ hấp thụ quang và các trạng thái điện tử của các chấm lượng tử bán dẫn. Từ dữ liệu mô phỏng, chúng tôi phân tích, lý giải về các hiệu ứng lượng tử trong hệ vật liệu bán dẫn thực khác nhau. Kết quả nghiên cứu đã xác nhận rằng, hình dạng của các chấm lượng tử có ảnh hưởng quan trọng đến phổ hấp thụ quang của các chấm lượng tử bán dẫn.

Trích dẫn: Nguyễn Thành Tiên và Phạm Thanh Dũng, 2016. Mô phỏng trạng thái điện tử và phổ hấp thụ của các chấm lượng tử có hình dạng khác nhau. Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ. 47a: 98-106.

1 GIỚI THIỆU

Sự phát triển nhanh chóng của các kỹ thuật sản xuất, tổng hợp các vật liệu cấu trúc nano đã dẫn đến sự hình thành một thế hệ mới các linh kiện cấu trúc nano. Sự phát triển này thật sự đã làm thay đổi cơ bản trong lĩnh vực điện tử, quang điện tử, tính toán khoa học, xử lý thông tin... (Michler và *ctv.*, 2000). Khi các cấu trúc nano bán dẫn có kích thước ở cấp độ nguyên tử thì các hiệu ứng cơ học lượng tử ảnh hưởng quan trọng vào các tính chất điện tử của hệ. Mô hình hóa và mô phỏng tiếp cận theo hướng liên tục trở nên không hiệu lực. Với các linh kiện chứa cỡ vài triệu nguyên tử có sự đa dạng hình học, đa dạng cấu hình tạp, đa dạng cấu trúc...

cần đến các công cụ, mô hình và phương pháp tính toán hiện đại. Phương pháp phiếm hàm mật độ (DFT) thường được áp dụng phổ biến hiện nay. Tuy nhiên, phương pháp này cần hạ tầng tính toán mạnh và thường sử dụng trong các nghiên cứu chuyên sâu. Công cụ mô hình nano điện tử-Nanoelectronic Modeling tool (NEMO) đã được phát triển cho mục đích giáo dục không cần kỹ thuật chuyên sâu nhưng đáp ứng được các yêu cầu nội dung vật lý hiện đại. NEMO thiết lập tính toán với hệ khoảng chục triệu nguyên tử được phát triển bởi Network for Computational Nanotechnology (NCN), đây là dạng nguồn mở và có phiên bản dùng cho mục đích giáo dục ở địa chỉ <http://www.nanoHUB.org>. NEMO đã ứng dụng

thành công cho các tính toán bậc nguyên tử của các trạng thái điện tử đơn hạt với các cấu trúc nano kích thước thực (Tien và *ctv.*, 2014). Ngày nay, việc sử dụng các chương trình nguồn mở và truy cập tính toán từ xa giúp cho việc nghiên cứu và học tập thuận lợi hơn, người dùng có cơ hội sử dụng các hạ tầng ở các cơ sở nghiên cứu khoa học tiên tiến mà các nơi mình chưa đáp ứng được.

Trong nghiên cứu các hệ vật liệu cấu trúc nano, các hệ này có nhiều dạng nhưng thường có ba dạng cơ bản: giếng lượng tử, dây lượng tử và chấm lượng tử (Reed, 1993). Các chấm lượng tử là các cấu trúc nano (Reed và *ctv.*, 1998) giam cầm tất cả ba chiều không gian các hạt tải (là các điện tử, lỗ trống hay exciton) làm cho hàm sóng của chúng bị cô lập mạnh, các trị riêng năng lượng bị gián đoạn (Petroff, 2003) dẫn đến nhiều đặc tính vật lý hấp dẫn mới lạ và các linh kiện dựa trên các hệ này có nhiều hiệu ứng mới (Quang và *ctv.*, 2012, Moreau và *ctv.*, 2001). Về mặt thực nghiệm, người ta có thể tạo ra nhiều dạng chấm lượng tử với hình dạng và kích thước khác nhau. Các chấm lượng tử thường có kích thước khoảng 2-8 nm, tương ứng với cỡ 100-10.000 nguyên tử nên đôi lúc người ta gọi chúng là các phân tử nhân tạo. Chúng thường được nuôi bằng nhiều phương pháp nhưng phương pháp epitaxy có sự lệch mạng (Moreau và *ctv.*, 2001) được xem là phương pháp tiên tiến nhất hiện nay. Chúng có thể phát triển ứng dụng cho các linh kiện quang lượng tử như laser lượng tử hay máy dò bức xạ hồng ngoại, transistor đơn electron... Các tạp trong chấm lượng tử bị giam cầm ba chiều cũng đóng vai trò quan trọng trong kỹ thuật bán dẫn, gần đây người ta đã đặt vấn đề sản xuất các linh kiện sử dụng trạng thái điện tử của tạp bị cô lập lượng tử (Petroff P, 2003). Các kỹ thuật mô hình cũng được tiếp cận để giải quyết các vấn đề vật lý đặc ra khi nhiều hiệu ứng vật lý xảy ra phải dựa trên các nền tảng vật lý cơ bản ban đầu.

Trong thời gian qua, có nhiều nghiên cứu liên quan đến chấm lượng tử bằng cả thực nghiệm lẫn tính toán (Hollenberg và *ctv.*, 2004; Vu, 2006). Tuy nhiên, phần nhiều nghiên cứu tính toán tập trung nghiên cứu theo phương pháp giải tích hay phương pháp số với các dạng chấm lượng tử đối xứng (Long và *ctv.*, 2009). Các nghiên cứu thực nghiệm

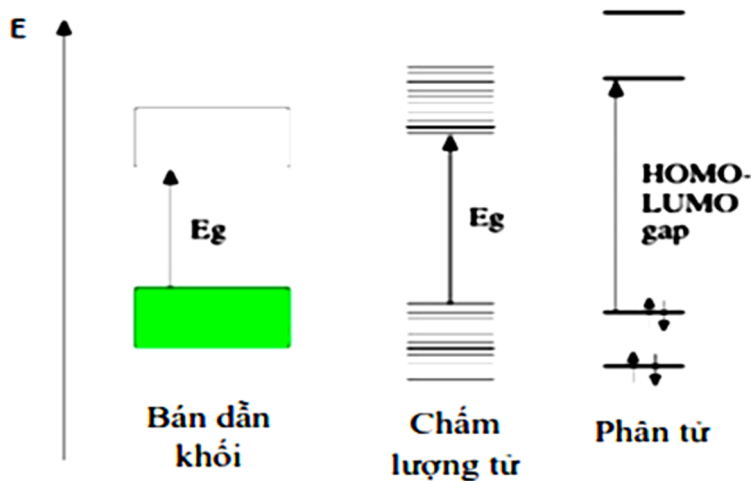
thường thực hiện theo phương pháp hóa học (Lam và *ctv.*, 2004) với các chấm lượng tử tự hình thành khó điều khiển, các nghiên cứu này thường hướng tới các ứng dụng môi trường, sinh học, với các nghiên cứu hướng đến các ứng dụng quang điện tử công nghệ cao thì thường phải được điều khiển tốt bằng các phương pháp nuôi hiện đại. Việc nghiên cứu các chấm lượng tử bằng các chương trình mô phỏng cũng có thể thực hiện bằng phương pháp mô phỏng động lực học (MD) để mô phỏng sự hình thành các chấm lượng tử khi nuôi (Hoang, 2007). Nghiên cứu khảo sát trạng thái điện tử và phổ hấp thụ quang điện tử với một số chấm lượng tử có hình dạng đối xứng: lập phương và bát đối xứng: vòm và kim tự tháp bằng phương thức mô phỏng với giao diện người dùng kết nối với siêu máy tính hoạt động từ xa.

2 CƠ SỞ LÝ THUYẾT

2.1 Hiệu ứng giam giữ lượng tử trong chấm lượng tử

Người ta biết rằng, khi kích thước của một “hạt” nhỏ cỡ bán kính Bohr sẽ xuất hiện hiệu ứng giam giữ lượng tử, trong đó các trạng thái điện tử cũng như các trạng thái dao động trong hạt bị lượng tử hóa. Từ công thức xác định bán kính Bohr $r_B = \frac{\epsilon \hbar^2}{e^2 m^*}$ cho thấy tùy thuộc vào bản chất vật liệu (hằng số điện môi ϵ và giá trị khối lượng rút gọn m^* của điện tử hay lỗ trống khác nhau) sẽ có hiệu ứng giam giữ lượng tử các hạt tải điện ở kích thước khác nhau. Hiệu ứng giam giữ lượng tử đã làm cho hạt vật liệu có tính chất giống như một nguyên tử nhân tạo với các trạng thái năng lượng của điện tử-lỗ trống rời rạc (tương tự như trong nguyên tử). Hình 1 minh họa giản đồ vùng năng lượng của chấm lượng tử. Chấm lượng tử xem như là trung gian giữa cấu trúc khối và phân tử cô lập.

Ta thấy rằng hiệu ứng giam giữ lượng tử làm thay đổi cấu trúc vùng năng lượng nên cũng làm thay đổi các tính chất vật lý khác, đặc biệt là mật độ trạng thái và tính chất quang. Mặt khác, ngoài việc phụ thuộc vào kích thước, hiệu ứng giam giữ lượng tử còn phụ thuộc vào hình dạng. Nói cách khác, hình dạng chấm lượng tử cũng chi phối mạnh sự giam giữ lượng tử và tính chất quang của chấm lượng tử.



Hình 1: Giải đồ minh họa cấu trúc vùng năng lượng của chấm lượng tử so sánh với bán dẫn khối và phân tử

2.2 Cơ sở vật lý cơ bản của sự hấp thụ quang

Cơ sở về sự hấp thụ quang trong chấm lượng tử tuân theo thuyết lượng tử và quy tắc chọn lọc trạng thái lượng tử (Ameenah, 2012). Vì thế, phổ hấp thụ quang của chấm lượng tử được quy định bởi cấu trúc vùng và trạng thái điện tử tương ứng.

Trong chế độ giam giữ mạnh (kích thước của chấm lượng tử nhỏ hơn nhiều so với bán kính Bohr của vật liệu khối tương ứng), một cách gần đúng có thể coi điện tử và lỗ trống chuyển động độc lập và bỏ qua tương tác Coulomb. Dựa vào quy tắc lọc lựa quang, các chuyển dời quang được phép xảy ra giữa các trạng thái điện tử và lỗ trống có cùng số lượng tử chính n và số lượng tử quỹ đạo l khi điện tử chuyển trạng thái. Do đó, phổ hấp thụ sẽ bao gồm các dải phổ gián đoạn có vị trí cực đại tại năng lượng xác định bởi (Ameenah, 2012):

$$E_{nl} = E_g + \frac{\hbar^2 \chi_{nl}^2}{2m^* R^2} \tag{1}$$

Trong đó, $\hbar = h / 2\pi$ (h là hằng số Planck có giá trị $6,626 \times 10^{-34} \text{J.s}$), χ_{nl} là hàm Bessel cầu, R là kích thước chấm lượng tử, m^* là khối lượng rút gọn của cặp điện tử-lỗ trống xác định bởi công thức quen thuộc có dạng:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \tag{2}$$

Vì thế, chuyển dời điện tử ứng với trạng thái điện tử-lỗ trống có mức năng lượng nhỏ nhất sẽ là:

$$E_{min} = E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* R^2} \tag{3}$$

Như vậy, so với bán dẫn khối, năng lượng chuyển dời điện tử cơ bản được gia tăng một lượng:

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* R^2} \tag{4}$$

so với vùng cấm của bán dẫn khối. Vì thế, ΔE được gọi là năng lượng giam giữ lượng tử, nó tỷ lệ nghịch với bình phương kích thước của hạt vật liệu chấm lượng tử. Với lí do này, quang phổ của các chấm lượng tử trong chế độ giam giữ mạnh thể hiện sự gián đoạn và bị chi phối mạnh bởi kích thước hạt. Trong thực hành, thường có thể quan sát thấy phổ vạch (huỳnh quang và hấp thụ) của một chấm lượng tử đơn với độ mở rộng đồng nhất phụ thuộc vào nhiệt độ; còn với một tập thể các chấm lượng tử bán dẫn có kích thước hạt khác nhau, thường quan sát thấy độ mở rộng phổ phụ thuộc vào phân bố kích thước hạt (Petroff, 2003).

Bức tranh đầy đủ về sự chuyển dời các hạt tải điện trong một chấm lượng tử thì không thể coi chuyển động của điện tử và lỗ trống là độc lập hoàn toàn. Do đó, bài toán cho cặp điện tử-lỗ trống với toán tử Hamilton sẽ bao gồm các số hạng động năng, thế năng tương tác Coulomb và thế giam giữ. Khi đó, trong phép gần đúng bậc nhất, năng lượng tương ứng với hai trạng thái kích thích cơ bản của cặp điện tử-lỗ trống được xác định bằng biểu thức sau (Ameenah, 2012):

$$E_{min} = E_g + \frac{\hbar^2 \chi_{nl}^2}{2m^* R^2} - \frac{1,8e^2}{\epsilon R} \tag{5}$$

Số hạng thứ ba thể hiện năng lượng tương tác Coulomb (exciton). Trong phép gần đúng bậc nhất, năng lượng chuyển dời cặp điện tử-lỗ trống liên kết trong chấm lượng tử có chứa hai số hạng phụ thuộc

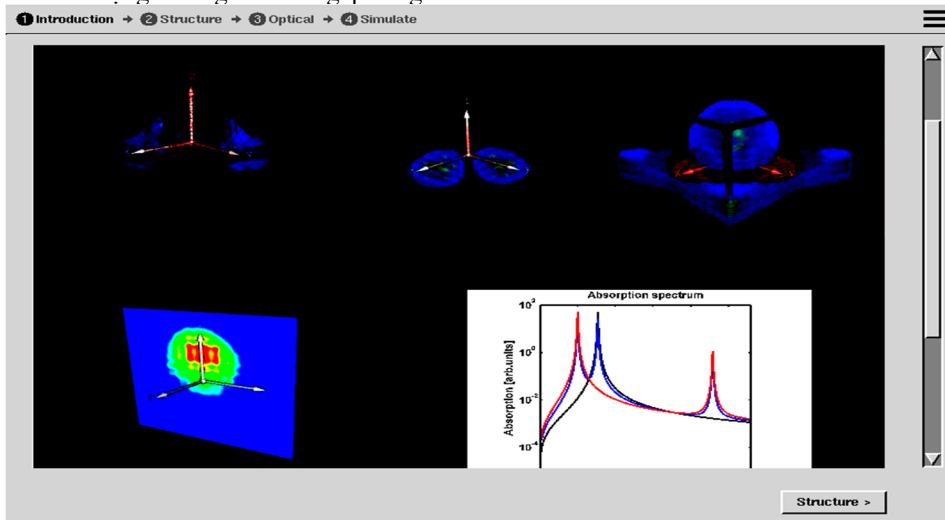
vào kích thước. Đó là năng lượng giam giữ tỷ lệ nghịch với R^2 và năng lượng tương tác Coulomb tỷ lệ nghịch với R . Vì thế, đối với các chấm lượng tử có kích thước rất nhỏ, hiệu ứng giam giữ lượng tử trở nên chiếm ưu thế. Ta thấy trong chấm lượng tử vai trò của hiệu ứng giam cầm lượng tử và hiệu ứng exciton trái ngược nhau cho đóng góp đến E_{min} .

Như đã đề cập ở mục 2.1, trạng thái điện tử và phổ hấp thụ phụ thuộc vào gián đồ vùng và chịu sự giam cầm lượng tử mạnh trong trường hợp chấm lượng tử. Gián đồ vùng được xác định thông qua việc giải phương trình Schrodinger. Phương trình Schrodinger là một phương trình vi phân bậc hai, thường giải nó trong bức tranh gần đúng một hạt. Vì thế, lời giải phương trình này phụ thuộc vào điều kiện biên tức là phụ thuộc vào kích thước và hình dạng của chấm lượng tử. Thông thường, ta chỉ giải được nghiệm ở dạng giải tích trong các trường hợp chấm lượng tử có dạng đối xứng: cầu, lập phương. Với các dạng không đối xứng phải giải

bằng phương pháp số tương đối phức tạp. Với việc, chỉ quan tâm đến các hiệu ứng vật lý mà không đi sâu vào chi tiết tính toán thì các công cụ mô phỏng là thiết thực. Trong phần sau, chúng tôi sẽ trình bày một số kết quả mô phỏng bằng công cụ NEMO với một số chấm lượng tử có dạng đối xứng và không đối xứng.

3 CÁC KẾT QUẢ MÔ PHỎNG

Quantum dot lab (*Gerhard Klimeck*) là công cụ chạy trên nền của NEMO. Quantum dot lab cho phép người sử dụng mô phỏng chấm lượng tử với các hình dáng và kích thước khác nhau, để thu được trạng thái điện tử và phổ hấp thụ quang của một số vật liệu theo các phương. Người sử dụng có thể lựa chọn nhiều loại vật liệu và các loại cấu trúc của chấm lượng tử trong thư viện các công cụ hỗ trợ. Hình 2 là giao diện của công cụ (*Để sử dụng công cụ này người dùng đăng ký và xin cấp quyền sử dụng trên trang web của NanoHub*).



Hình 2: Giao diện của quantum dot lab

Người dùng cần nhập vào các tham số liên quan đến cấu trúc và các tham số thiết kế thí nghiệm đo phổ quang. Chương trình sẽ nhập và thực thi qua một số bước để ta thu được các kết quả xuất ra. Xử lý các dữ liệu ngõ ra, ta thu được các thông tin vật lý.

3.1 Kết quả mô phỏng với các cấu trúc chấm lượng tử có dạng lập phương

Tiến hành mô phỏng chấm lượng tử đơn với 10 trạng thái đầu tiên. Kích thước của chấm theo các phương được chọn là $L_x = 8 \text{ nm}$, $L_y = 8 \text{ nm}$, $L_z = 8 \text{ nm}$. Chúng tôi chọn ba vật liệu quen thuộc là GaAs, GaN và Si để mô phỏng. Các tham số nhập vào lấy từ dữ liệu Ioffe (Ioffe

Semiconductor). Đây là hệ thống tập hợp các thông số của các hợp chất bán dẫn được cập nhật. Ở đây chúng tôi tập trung nghiên cứu phổ hấp thụ vì vậy cần xác định hai tham số góc: θ (góc hợp bởi phương của nguồn bức xạ so với phương Oz gắn với mẫu nghiên cứu) và ϕ (góc hợp bởi hình chiếu của nguồn bức xạ xuống mặt phẳng Oxy với phương Ox). Để nghiên cứu phổ hấp thụ, nguồn bức xạ thường chọn là nguồn phân cực. Chúng tôi chỉ quan tâm hiệu ứng hấp thụ cơ bản nên chúng tôi chọn $\theta = \phi = 0^\circ$. Nhiệt độ môi trường được chọn là nhiệt độ phòng thí nghiệm 300 K. Bảng 1 dưới đây cung cấp kết quả hai mức năng lượng đầu tính được.

Bảng 1: Bảng giá trị năng lượng lượng tử của các vật liệu GaAs, Si, GaN với chấm lượng tử có dạng hình lập phương

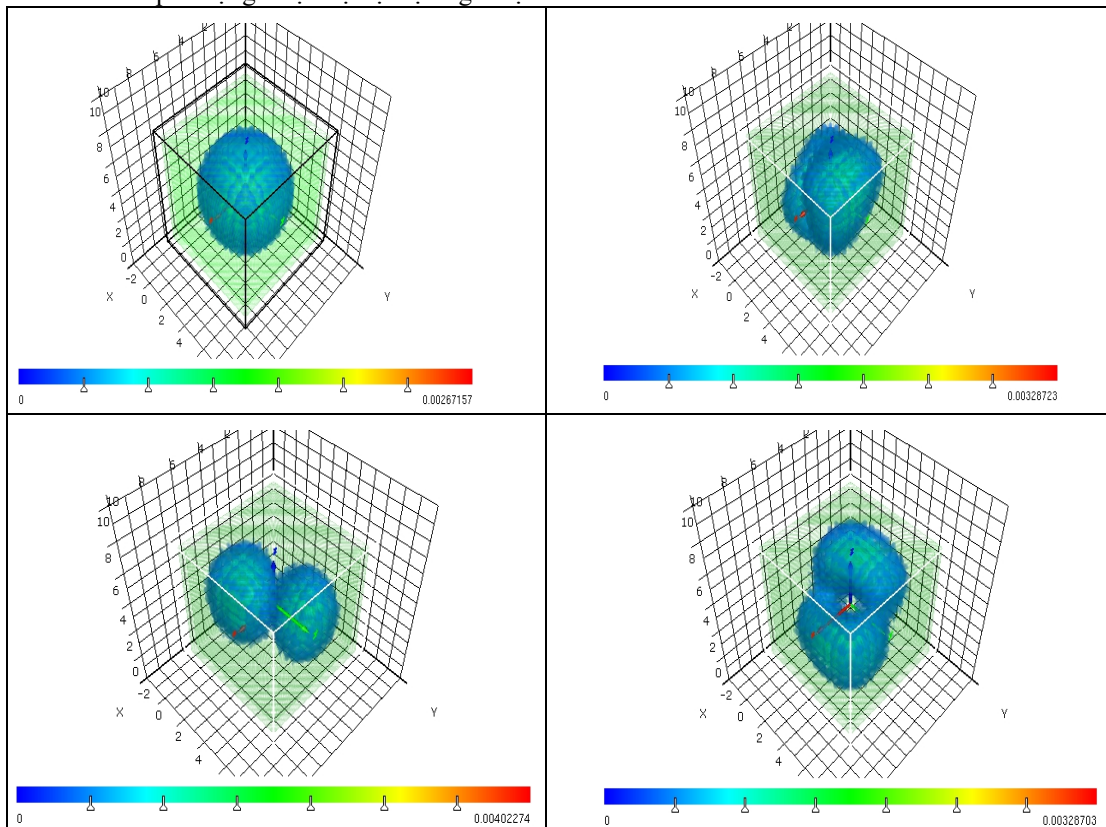
Giá trị năng lượng	GaAs	Si	GaN
Trạng thái cơ bản (E_1)	1,74 eV	1,45 eV	0,29 eV
Trạng thái kích thích thứ nhất (E_2)	2,5 eV	1,47 eV	0,44 eV
Khoảng năng lượng cơ bản ($E_{min} = E_2 - E_1$)	0,76 eV	0,02 eV	0,15 eV

Ở đây mức năng lượng có giá trị thấp nhất chọn bằng 0, độ rộng vùng cấm của GaAs, Si, GaN khối ở 300 K tương ứng là 1,42, 1,14, 3,40 eV [16]

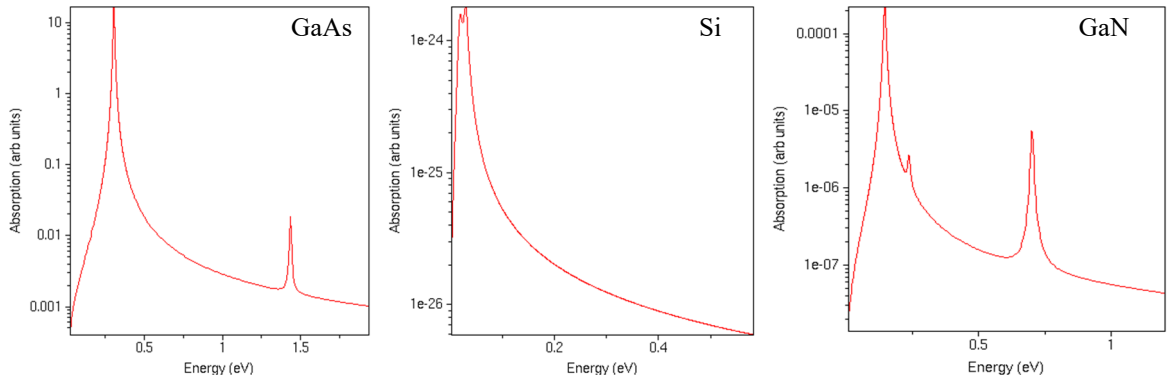
Sau đây là kết quả mô phỏng, trạng thái điện tử ba chiều với 4 mức năng lượng đầu tiên của vật liệu GaAs và phổ hấp thụ của ba vật liệu.

Phổ hấp thụ của vật liệu GaAs có đỉnh phổ đạt cực đại tại vị trí giá trị $E = 0,76 eV$. Phổ có dạng dốc đứng khi năng lượng tăng từ 0 đến 0,76 eV và độ hấp thụ giảm theo đường cong có dạng parabol, khi giảm đến giá trị năng lượng $E = 1,35 eV$ lúc này ta quan sát thấy phổ hấp thụ có thêm cực đại thứ hai. Cả cực đại thứ nhất và cực đại thứ hai của đồ thị phổ hấp thụ có bề rộng tương đối lớn, giá trị cực đại thứ nhất khoảng 10, giá trị cực đại thứ hai khoảng 0,02, chênh lệch nhau cỡ ba bậc độ lớn. Với Si ta quan sát thấy chỉ có đỉnh cực đại tại $E = 0,02 eV$, sau đó độ hấp thụ giảm nhanh đến không theo đường cong có dạng parabol. Giá trị độ hấp thụ khá nhỏ so với GaAs hoặc GaN. Phổ hấp thụ với GaN có đỉnh phổ đạt giá cực đại tại vị trí giá trị

$E = 0,14 eV$, đồ thị có dạng dốc đứng khi năng lượng tăng từ 0 đến 0,14 eV và độ hấp thụ giảm theo đường cong dạng parabol, khi giảm đến giá trị năng lượng $E = 0,24 eV$ có thêm cực đại thứ hai và tiếp tục giảm đến khoảng 0,78 eV thì xuất hiện cực đại thứ ba. Cả cực đại thứ nhất và cực đại thứ ba của phổ có bề rộng lớn, nhưng hẹp hơn so với GaAs và lớn hơn nhiều so với Si. Độ hấp thụ của GaN có giá trị khá nhỏ và đạt cực đại 0,0001 tương ứng với năng lượng 0,15 eV. Từ các kết quả phổ hấp thụ thu được, rõ ràng thấy rằng, trong trường hợp này vai trò giam cầm lượng tử là không quan trọng mà liên kết exciton là quan trọng, vì kích thước chọn lớn không ảnh hưởng nhiều giam cầm lượng tử (Chúng tôi đã mô phỏng và ghi nhận rằng hiệu ứng lượng tử sẽ có tác dụng khi L cỡ 6 nm). Với GaAs và GaN, ta có thể quan sát được đỉnh phổ thứ hai nhưng cường độ giảm đáng kể.



Hình 3: Hàm sóng ba chiều của bốn trạng thái đầu của chấm lượng tử GaAs dạng lập phương



Hình 4: Đồ thị phổ hấp thụ của ba vật liệu GaAs, Si, GaN tương ứng từ trái sang phải

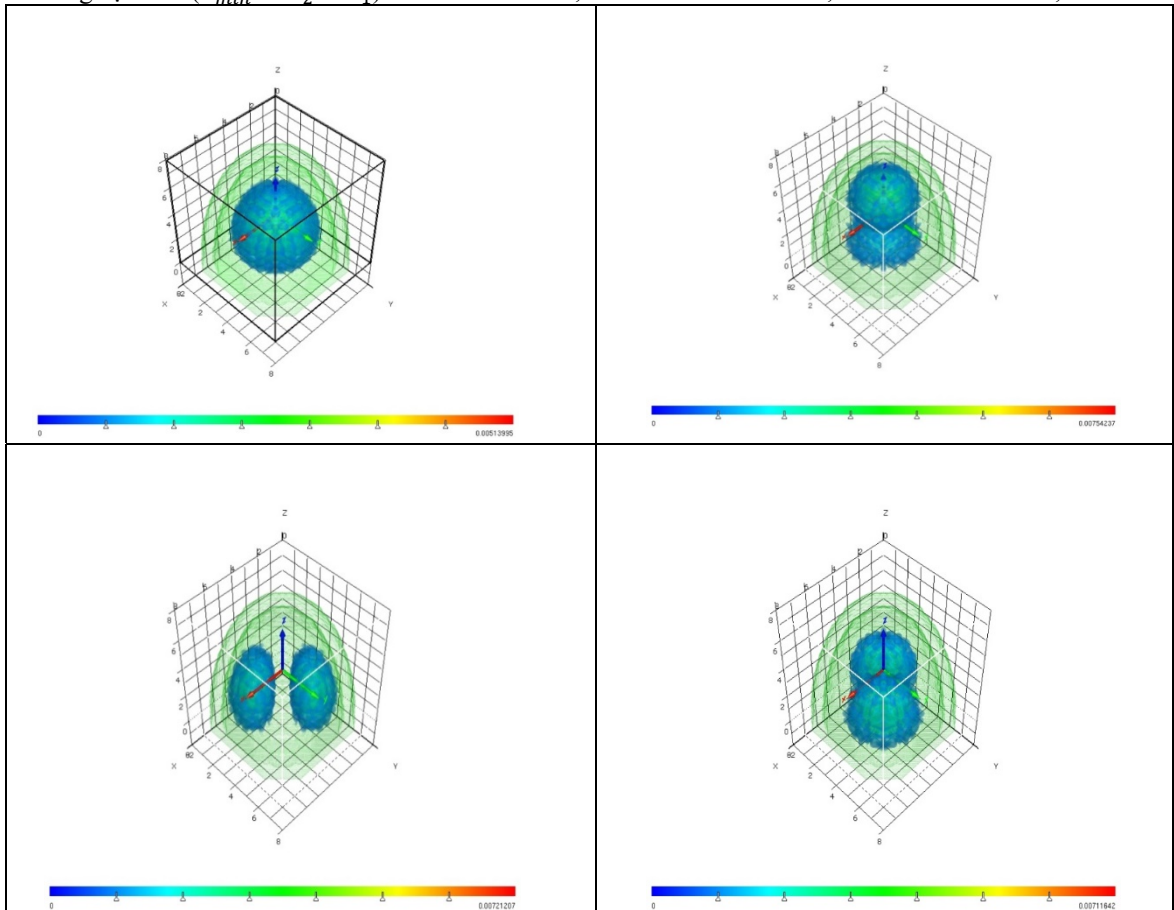
3.2 Kết quả mô phỏng với các chấm lượng tử có dạng hình vòm

Tương tự như chấm lượng tử hình lập phương,

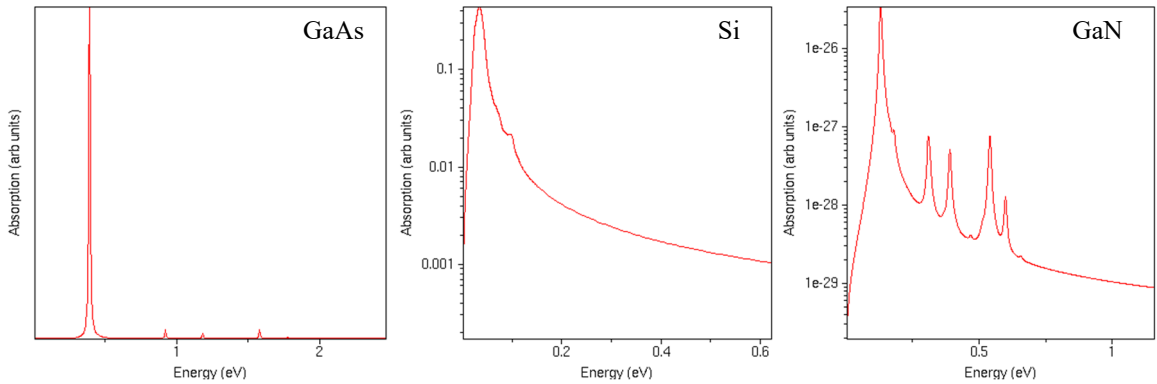
chúng tôi cũng mô phỏng với các tham số cơ bản tương tự. Bảng 2 sau cung cấp kết quả hai mức năng lượng đầu tính được.

Bảng 2: Giá trị các mức năng lượng lượng tử

Giá trị năng lượng	GaAs	Si	GaN
Trạng thái cơ bản (E_1)	1,88 eV	0,05 eV	1,58 eV
Trạng thái kích thích thứ nhất (E_2)	2,27 eV	0,07 eV	1,71 eV
Khoảng cực tiểu ($E_{min} = E_2 - E_1$)	0,39 eV	0,02 eV	0,13 eV



Hình 5: Hàm sóng ba chiều của bốn trạng thái đầu của chấm lượng tử GaAs dạng hình vòm



Hình 6: Đồ thị phổ hấp thụ của ba vật liệu GaAs, Si, GaN tương ứng từ trái sang phải

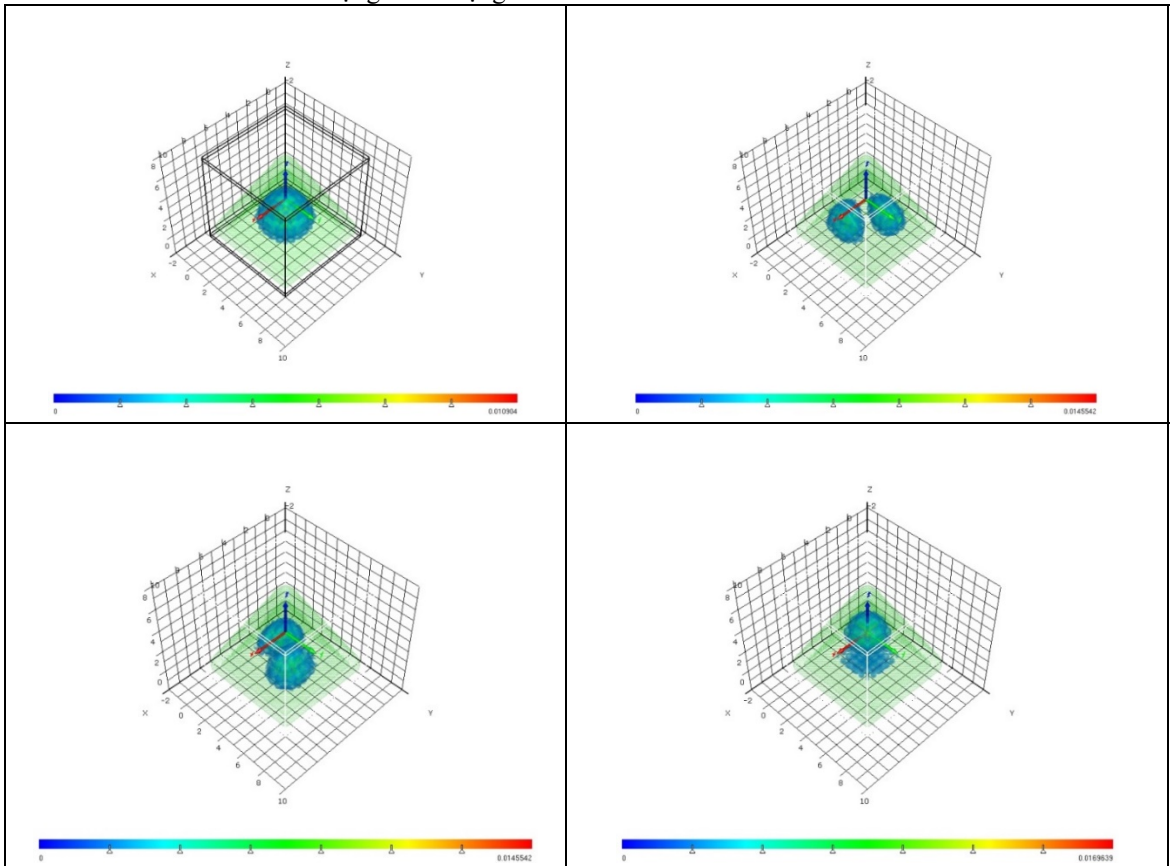
Phổ hấp thụ của Si với cấu trúc hình vòm gần giống với cấu trúc lập phương. Tuy nhiên, số đỉnh quan sát được có thay đổi, điều này thể hiện tính chất đối xứng của chấm lượng tử kết hợp với đối xứng tinh thể ảnh hưởng đến quy tắc lựa chọn (có liên quan đến tính đối xứng) làm thay đổi các chuyển dời được phép.

3.3 Kết quả mô phỏng với các chấm lượng tử có dạng kim tự tháp

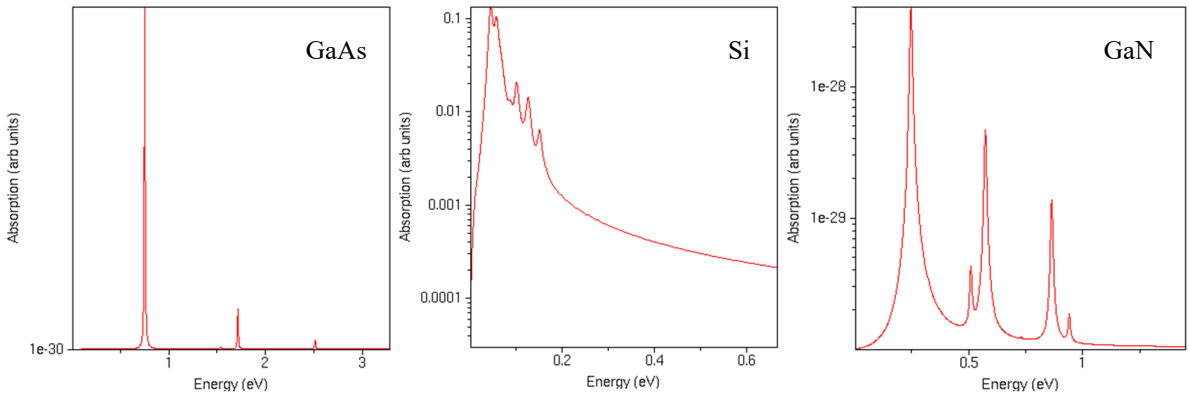
So với cấu trúc lập phương và cấu trúc dạng hình vòm thì cấu trúc chấm lượng tử có dạng kim

tự tháp có tính chất bất đối xứng cao hơn. Mặc dù năng lượng cấm và khối lượng hiệu dụng khối giống với hai trường hợp trên nhưng biên khác nhau cơ bản vì thế phổ hấp thụ cơ bản của nó sẽ khác so với cấu trúc lập phương và cấu trúc dạng vòm. Bảng 3 cung cấp kết quả hai mức năng lượng đầu tính được.

Sau đây là kết quả mô phỏng hàm sóng 3D và phổ năng lượng hấp thụ của chấm lượng tử kim tự tháp.



Hình 7: Hàm sóng ba chiều của bốn trạng thái đầu của chấm lượng tử GaAs dạng kim tự tháp



Hình 8: Đồ thị phổ hấp thụ của ba vật liệu GaAs, Si, GaN tương ứng từ trái sang phải

Bảng 3 : Giá trị các mức năng lượng lượng tử

Giá trị năng lượng	Vật liệu GaAs	Vật liệu Si	Vật liệu GaN
Trạng thái cơ bản (E_1)	2,24 eV	0,06 eV	1,69 eV
Trạng thái kích thích thứ nhất (E_2)	2,90 eV	0,10 eV	1,90 eV
Khoảng cực tiểu ($E_{min} = E_2 - E_1$)	0,66 eV	0,04 eV	0,21 eV

Ta cũng thấy rằng, các hàm sóng ba chiều sẽ thay đổi dạng khác nhau ứng với ba trường hợp nghiên cứu. Đó chính là cơ sở giải thích dạng phổ hấp thụ khác nhau, các trạng thái đối xứng khác nhau nên số chuyển dời được phép sẽ thay đổi.

4 KẾT LUẬN

Sử dụng công cụ Quantum dot Lab, sự ảnh hưởng của các dạng chấm lượng tử khác nhau lên sự thay đổi trạng thái điện tử và phổ hấp thụ đã được mô phỏng chi tiết. Công cụ mô phỏng này hiệu quả cho việc xác định tính chất điện tử và phổ hấp thụ quang của các dạng chấm lượng tử với nhiều loại vật liệu. Đây là công cụ mô phỏng trực quan dễ sử dụng, giúp dễ phân tích các hiện tượng vật lý lượng tử phức tạp. Nghiên cứu này chỉ quan tâm so sánh các dạng chấm lượng tử chứ chưa phân tích hiệu ứng giam cầm. Muốn phân tích hiệu ứng giam cầm ta có thể thay đổi kích thước của chấm lượng tử. Ngoài ra, Quantum dot Lab chạy trên nền NEMO, công cụ có thể mô phỏng từ xa cho nhiều vấn đề vật lý. Chương trình mô phỏng này chạy trên máy chủ từ xa nên có thể sử dụng được hệ máy tính mạnh để tính các vấn đề vật lý cấu trúc nano mong muốn. Nó có tính sự phạm cao trong việc nghiên cứu các vấn đề vật lý hiện đại.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Ameenah Al-Ahmadi (2012), Optical and Transport Properties of Quantum Dot, InTech.
 Doan Nhat Quang, Nguyen Nhu Dat, Nguyen Thanh Tien and Dinh Nhu Thao, Single-valued estimation of the interface profile from intersubband absorption linewidth data, Appl. Phys. Lett, 100, 113103 (2012).

Duong Xuan Long, Nguyen Hong Quang, Tran The Trung, Vu Duc Tho, Somsavath Leuangtakoun, Charging Effects on Interband Transitions in Two-Dimensional Quantum Dots, Communication in Physics, 19, 65-73 (2009).
 Gerhard Klimeck, Introduction to Quantum Dot Lab, accessed on 18 December 2015. Available from <https://www.nanohub.org/resources/4194>
 Hollenberg L et al. (2004) Charge-based quantum computing using single donors in semiconductors, Phys Rev B 69:11330
 Ioffe Semiconductor, accessed on 10 December 2015. Available from <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond>.
 Lam. H. Nguyen, V. Le Thanh, V. Yam, D. Débarre, M. Halbwx, and D. Bouchier (2004), Formation and optical properties of Ge quantum dots selectively grown on patterned Si(001) substrates, Physica Status Solidi (a), 20, 1353.
 Michler P, Kiraz A, Becher C, Schoenfeld W, Petroff P, Zhang L, Hu E, Imamoglu A (2000) A Quantum Dot Single-Photon Turnstile Device. Science 290:2282-2285.
 Moreau E, Robert I, Manin L, Thierry-Mieg V, Gérard J, Abram I (2001) Quantum Cascade of Photons in Semiconductor Quantum Dots. Phys Rev Lett 87:183601
 Nguyen Thanh Tien, Tran Hong Nghia (2014), Mô phỏng transistor hiệu ứng trường dây nano kẽm oxit, Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ, 30a, 20.
 Nguyễn Vũ (2006), Chế tạo và nghiên cứu tính chất quang học của vật liệu nano phát quang chứa ion đất hiếm, Luận án Tiến sĩ khoa học Vật liệu, Viện Khoa học Vật liệu, Hà Nội.

Petroff P (2003) Single Quantum Dots: Fundamentals, Applications, and New Concepts. Springer, Berlin.

Reed M, Randall J, Aggarwal R, Matyi R, Moore T, and Wetsel A (1988) Observation of discrete electronic states in a zero-dimensional semiconductor nanostructure. Phys Rev Lett 60:535.

Reed M (1993) Quantum Dots. Scientific American 268:118.

Petroff P (2003) Single Quantum Dots: Fundamentals, Applications, and New Concepts. Springer, Berlin.

V. V. Hoang (2007), Molecular Dynamics Simulation of Amorphous SiO₂ Nanoparticles, J. Phys. Chem. B, 111 (44), 12649–12656.