

## تألق النقط الكمومية

د. أصف محسن يوسف\*

(تاريخ الإبداع 2 / 10 / 2022 – تاريخ النشر 10 / 1 / 2023)

□ ملخص □

قدّمت في هذا العمل نموذجاً نظرياً لتفسير الطيف التجريبي لتألق النقط الكمومية بعد تعرّضها لأشعة فوق بنفسجية وذلك من خلال تمثيل النقط الكمومية بإلكترون موجود في حفرة كمون لانهائية على ثلاثة أبعاد  $(X, y, Z)$  مكعبة الشكل طول ضلعها  $(a)$ . وقمت بعد ذلك بإيجاد التوابع الخاصة والقيم الخاصة المُقابلة لها من خلال حلّ معادلة شرودنغر المُستقرّة في هذه الحفرة. ثمّ قارنت النتائج التي حصلت عليها مع النتائج التجريبية مع صحة النموذج النظري.

الكلمات المفتاحية: النقط الكمومية، ميكانيك الكم، حفرة كمون لانهائية، معادلة شرودنغر.

## Quantum dots photoluminescence

Dr. Asef Mohsen Youssef\*

(Received 2/10/2022.Accepted 10/1/2023)

### □ABSTRACT □

I give in the present work a theoretical model to explain the experimental spectrum of photoluminescence of Quantum Dots after exposing to the UV rays by exemplifying Quantum Dots as an electron present in infinite potential well  $(x, y, z)$  of length  $(a)$ . I found a eigenfunctions and the eigenvalues corresponding to it by solution the stationary Schrödinger equation in that infinite potential well. A comparison between the experimental and theoretical results were done to be sure that my theoretical model is correct.

**Keywords:** Quantum Dots, Quantum Mechanics, Infinite Potential well, Schrödinger equation.

---

\*Associate Professor ,Department of Physics, Faculty of Science, Tartous University, Tartous, Syria

## المقدمة:

تم الكشف عن النقط الكمومية، وهي بلورات نانوية نصف ناقلة يتراوح قطرها بين  $1(nm)$  إلى  $20(nm)$ ، وحضرها بروس (Brus) في المحاليل الغروية [٢,١]، حيث أوضح فيه تأثير أبعاد بلورات مركب سيلانيد الكاديوم CdSe مع المحافظة على حجم وبنية منتظمين لها، في تحسين خواصها الإلكترونية والمغناطيسية والضوئية.

## أهمية البحث وأهدافه :

توظف النقط الكمومية وتستخدم في مجالات عديدة منها

- ١- تصنيع الخلايا الفولطائية لتحويل الطاقة الشمسية إلى طاقة كهربائية .
  - ٢- تصنيع الديودات الباعثة للضوء .
  - ٣- استخدام النقط الكمومية كواسمات لتحديد منطقة الورم الخبيث في الجسم البشري .
- والهدف من هذا البحث هو إيجاد نموذج نظري لتفسير تغير لون التألق الفوتوني للنقط الكمومية بدلالة أبعادها.

## طرائق البحث ومواده :

درست النقط الكمومية نظرياً بعدة طرق منها حل معادلة شرودنجر بطرق مختلفة منها:

- طريقة هارترى-فوك بإيجاد تابع تجريبي ووضعه كحل أولي لمعادلة شرودنجر وتبين أن هذه النظرية لا تتمكن من أن تصل إلى السوية الدنيا للطاقة [٣].
- نظرية الكثافة التابعية (Density Functional Theory) باعتمادها على تابع الكثافة والصعوبة هي إيجاد تابع الكثافة [٤].

- طريقة مونت - كارلو (QMC) وهي الطريقة الإحصائية كون عدد الجسيمات كبير جداً [٥].

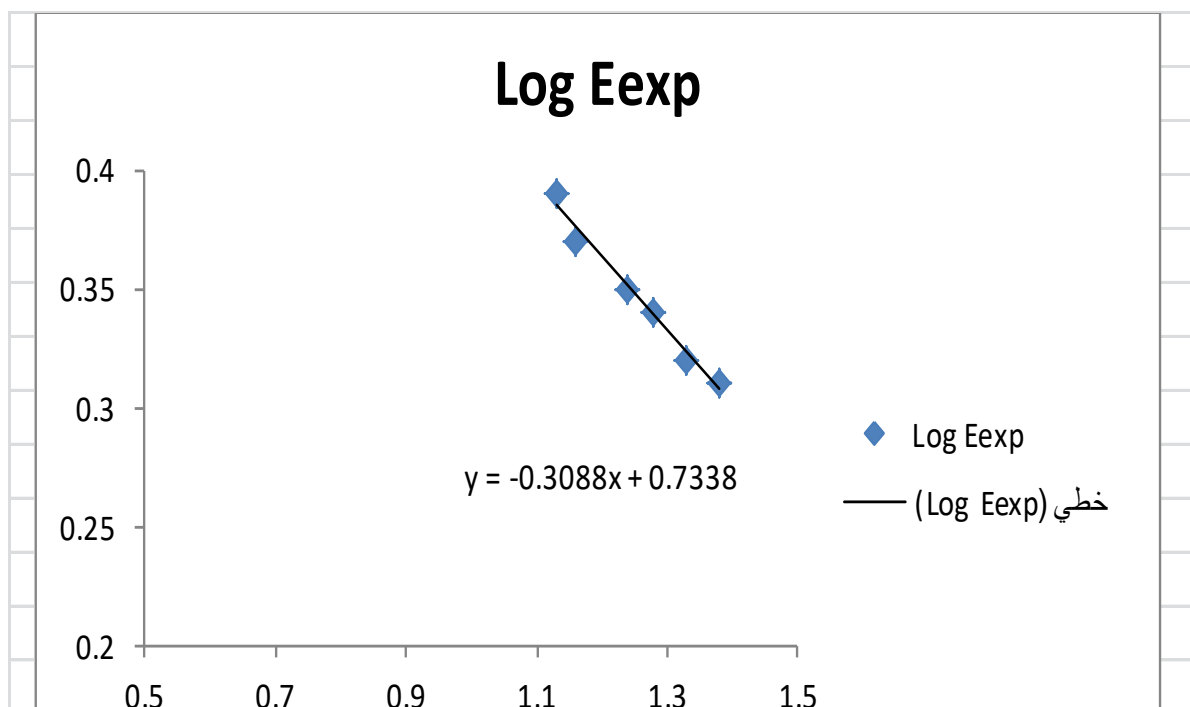
نفترض أن النقطة الكمومية هي الكترون حر موجود في حفرة كمون لانهائية الأبعاد وسنحاول تفسير الطيف التجريبي لتألق النقط الكمومية بدلالة أبعاد هذه الحفرة باعتبار أن التألق ناتج عن انتقال الكترون من سوية الطاقة الثانية (سوية الطاقة الأولى المثارة) إلى سوية الطاقة الأولى (السوية الأرضية) باعتبار أن طاقة الفجوة هي:  $E_g = 1.74 (eV)$  [٦]. باعتماد النتائج التجريبية [٧,٨] التي تربط لون الفوتون وطول موجته وأبعاد النقط الكمومية لعنصر سيلانيد الكاديوم CdSe كما في الجدول (١).

نحسب  $E_{exp}$  طاقة الفوتونات المتألقة تجريبياً مقدره بوحدة  $(eV)$  وذلك من خلال تطبيق قانون أينشتاين  $E = hv = h \frac{c}{\lambda} = \frac{12400eV.A^\circ}{\lambda(A^\circ)}$  حيث يُمثل:  $h = 6.6 \times 10^{-34} J.s$  ثابت بلانك و  $c = 3 \times 10^{+8} m/s$  سرعة الضوء في الخلاء و  $\nu$  تواتر الموجة، فنحصل على القيم الموجودة في الجدول (١).

جدول (١): طاقة الفوتونات المتألقة تجريبياً  $E_{exp}$  للنقط الكمومية ولون تألقها وطول أمواجها بدلالة أبعادها التجريبية  $a$

اللون	$\lambda_{exp}(nm)$	$a(\text{Å})$	$\log a$	$E_{exp}(eV)$	$\log E_{exp}$
أحمر	610	٢٤.٠	١.٣٨	٢.٠٣	٠.٣١
برتقالي	590	٢١.٥	١.٣٣	٢.١٠	٠.٣٢
أصفر	570	١٩.٠	١.٢٨	٢.١٧	٠.٣٤
أخضر	555	١٧.٥	١.٢٤	٢.٢٣	٠.٣٥
أخضر مزرق	530	١٤.٥	١.١٦	٢.٣٣	٠.٣٧
أزرق	٥١٠	١٣.٥	١.١٣	٢.٤٣	٠.٣٩

نرسم المنحني البياني للتابع  $\log E_{exp} = f(\log a)$  بواسطة برنامج الإكسيل، الشكل (١):



الشكل (١): المنحني البياني للتابع  $\log E_{exp} = f(\log a)$

نلاحظ من الشكل (١) أن ميل المنحني سالب وأن العلاقة الرياضية التي تعبر عن المنحني هي:

$$\log E_{exp} = -0.31 \log a + 0.73 = -0.31 \log a + \log k_{exp}$$

### الدراسة النظرية :

تُعطى معادلة شرودنغر المُستقرة (غير التابعة للزمن) على بعد واحد  $x$  بالشكل:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{8m} \nabla^2 + \hat{V}(x)\right] \varphi(x) = E \varphi(x)$$

حيث ترمز  $\hat{V}(x)$  للطاقة الكامنة للجملّة الفيزيائية.

عند حل معادلة شرودنغر المُستقرة لإلكترون (نقطة كمومية) كتلته  $m = 9 \times 10^{-31} \text{ kg}$  في حفرة

كمون لانتهائية البعد وفق محور واحد  $x$  نجد أن قيم الطاقة (القيم الخاصة) هي:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{8ma^2} n^2 \quad ; n = 1, 2, 3, \dots$$

المقابلة للتابع الخاص:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

إن معادلة شرودنغر لإلكترون في حفرة ثلاثية الأبعاد  $a_1, a_2, a_3$  هي:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{8m} \nabla^2 + \hat{V}(x, y, z)\right] \varphi(x, y, z) = E \varphi(x, y, z)$$

حيث نَفرض أنَّ الطاقة الكامنة داخل الحفرة معدومة وخارجها لانهائية وبالتالي تصبح المعادلة داخلها

$$-\frac{h^2}{8m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \varphi(x, y, z) = E \varphi(x, y, z)$$

إن هذه المعادلة محلولة في جميع كتب ميكانيك الكم بطريقة فصل المتحولات وستتحول إلى ثلاث معادلات

تتعلق كل منها بأحد المتحولات وفق ثلاث قيم طاقة كل منها باتجاه محور ومجموعها يساوي الطاقة الكلية

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3}$$

تأخذ هذه المعادلات الصيغة :

$$-\frac{h^2}{8m} \frac{d^2}{dx_i^2} \varphi_{n_i}(x_i) = E_{n_i} \varphi_{n_i}(x_i) ; \begin{cases} i = 1, 2, 3 \\ x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z \end{cases}$$

ويكون حل هذه المعادلة من الشكل التالي:

$$\varphi_{n_i}(x_i) = \sqrt{\frac{2}{a_i}} \sin\left(\frac{n_i \pi}{a_i} x_i\right)$$

ويُصبح الحل العام لمعادلة شرودنغر:

$$\varphi(x, y, z) = \varphi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \varphi_{n_1}(x) \varphi_{n_2}(y) \varphi_{n_3}(z) ; n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$$

وتكون الطاقة الكلية في حالة حفرة كمون مكعبة طول ضلعها  $a$  هي:  $E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{h^2}{8ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$

$n_3^2$ )

وبالتالي فإن طاقة السوية الأولى  $n_1 = n_2 = n_3 = 1$  وبالتالي فإن

$$E_1 = E_{111} = \frac{3h^2}{8ma^2} = 3E ; E = \frac{h^2}{8ma^2}$$

يُظهر الجدول (٢)، سوية الطاقة الثانية

الجدول (٢) القيم المختلفة لـ  $n_1, n_2, n_3$  والتي تُعطي سوية الطاقة الثانية

$n_1$	$n_2$	$n_3$	$E_{n_1 n_2 n_3}$	$\varphi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z)$	درجة الانطباق
٢	١	١	$6E$	$\varphi_{211}(x, y, z)$	٣
١	٢	١	$6E$	$\varphi_{121}(x, y, z)$	٣
١	١	٢	$6E$	$\varphi_{112}(x, y, z)$	٣

نلاحظ أن سويات الطاقة من الدرجة الثالثة أي تقابل ثلاث توابع موجية مختلفة وهي:

$$\cdot \varphi_{211}(x, y, z) \neq \varphi_{121}(x, y, z) \neq \varphi_{112}(x, y, z)$$

يصدر الفوتون المتألق عند انتقال الإلكترون من سوية الطاقة الثانية إلى الأولى وبالتالي تكون  $E_{the}$  طاقته:

$$E_{the} = \Delta E = E_2 - E_1 = 6 \frac{h^2}{8ma^2} - 3 \frac{h^2}{8ma^2} = 3 \frac{h^2}{8m} a^{-2} = K_{the} a^{-2} = K_{the} a^{-n_{the}}$$

$$K_{the} = 3 \frac{h^2}{8m} = 113 \text{ أي أنّ القيمة النظرية للثابت:}$$

بأخذ لوغاريتم  $E_{the}$  لسوية الطاقة الثانية نجد:

$$\log E_{the} = \log K_{the} - 2 \log a = -2 \log a + 2.05$$

بمقارنة معادلة  $\log E_{the}$  مع معادلة  $\log E_{exp}$  التجريبية التالية:

$$\log E_{exp} = -0.31 \log a + 0.73 = -0.31 \log a + \log k_{exp}$$

بمقارنة قيم  $\log E_{exp}$  مع قيم  $\log E_{the}$  نلاحظ ما يلي: توافق في الشكل، والميل لكل منهما سالب مع

اختلاف بالقيم بين القيم النظرية والتجريبية للميل وللثابت  $K_{the}$ .

تُدخل بعض التعديلات في النموذج النظري من أجل التوافق بين القيمتين التجريبية والنظرية ومن أجل ذلك نفرض

$$K_{the} = \alpha K_{exp} \Rightarrow \alpha = \frac{K_{the}}{K_{exp}} = \frac{113}{5} = 22.6$$

نحسب طاقة الفوتون حسب النموذج النظري بعد إضافة طاقة تنشيط (طاقة الفجوة  $E_g$ ) أي أن:

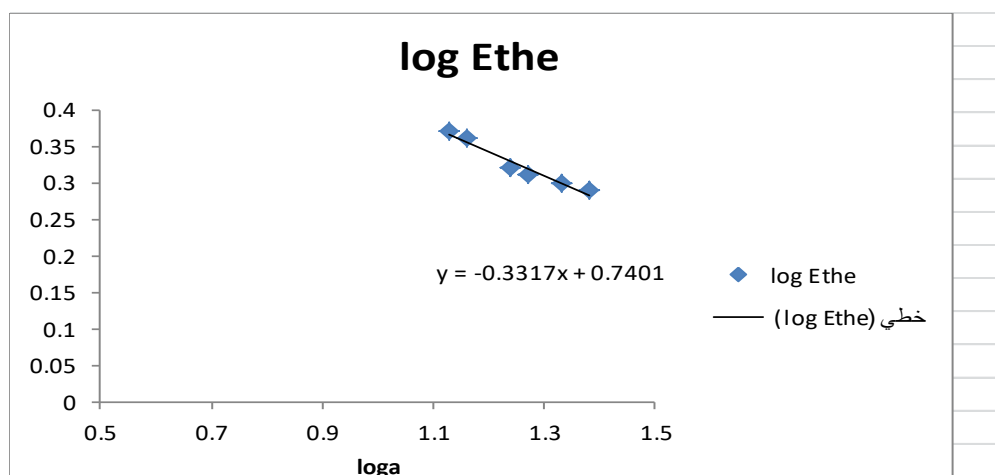
$$E_{the} = \Delta E + E_g = \frac{3h^2}{8ma^2} + 1.74$$

فنحصل على القيم كما في الجدول (٣)

جدول (٣) طاقة الفوتونات المتألقة نظرياً للنقط الكمومية

اللون	$\lambda_{exp}(nm)$	$a(\text{\AA})$	$\log a$	$E_{the}(eV)$	$\log E_{the}$
أحمر	610	٢٤	١.٣٨	1.94	٠.٢٩
برتقالي	590	٢١.٥	١.٣٣	1.99	٠.٣٠
أصفر	570	١٩	١.٢٨	2.05	٠.٣١
أخضر	555	١٧.٥	١.٢٤	2.11	٠.٣٢
أخضر مزرق	530	١٤.٥	١.١٦	٢.٣٣	٠.٣٦
أزرق	٥١٠	١٣.٥	١.١٣	٢.٣٦	٠.٣٧

برسم المنحني البياني للتابع  $\log E_{the} = f(\log a)$  الشكل (٢)



الشكل (٢):  $\log E_{the} = f(\log a)$

نلاحظ من مقارنة قيم الطاقة النظرية مع التجريبية في الجدولين والشكلين أن القيم النظرية لطول الموجة من العلاقة  $\lambda = \frac{hc}{E}$  تقترب كثيراً من التجريبية وهي أقل وتتناسب عكساً مع أبعاد النقط الكمومية.

$$\log E_{exp} = -0.31 \log a + 0.73$$

$$\log E_{the} = -0.33 \log a + 0.74$$

### تطوير النموذج النظري:

إن البعد بين سويتي الطاقة الأولى والثانية صغير أي أن أبعاد حفرة الكمون مختلف عن  $a$  سنفترض قاعدة الحفرة مربع طول ضلعه  $c$  وارتفاع مختلف  $b$  وبالتالي فالحجم  $bc^2$  وبالتالي نحصل على القيم الخاصة للطاقة

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{n_1^2}{c^2} + \frac{n_2^2}{c^2} + \frac{n_3^2}{b^2} \right) ; n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3$$

فتكون سوية الطاقة الأولى  $n_1 = n_2 = n_3 = 1$

$$E_{111} = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{2}{c^2} + \frac{1}{b^2} \right)$$

وفي السوية الثانية في الحالات  $(n_1 = 2, n_2 = n_3 = 1)$  &  $(n_2 = 2, n_1 = n_3 = 1)$  &  $(n_3 = 2, n_2 = n_1 = 1)$

فإن طاقة السوية الثانية مساوية للقيم:

$$E_{211} = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{5}{c^2} + \frac{1}{b^2} \right) \text{ و } E_{121} = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{5}{c^2} + \frac{1}{b^2} \right) , E_{112} = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{2}{c^2} + \frac{4}{b^2} \right)$$

تُلاحظ أن تغيير شكل الخلية قد أزال الانطباق عند سوية الطاقة الثانية. يمكن دراسة الفرق بين السوية الأولى

وسويات الطاقة الثانية من خلال علاقة  $b$  بـ  $c$

### النتائج والمناقشة:

- فسّر النموذج النظري المقترح تألق النقط الكمومية .
- حصلنا على توافق في ميل المنحني وأيضاً توافق بالشكل العام للقيم التجريبية مع القيم النظرية حسب العلاقاتين

$$\log E_{exp} = f(\log a) \quad \text{و} \quad \log E_{the} = f(\log a)$$

لم يستطع هذا النموذج تفسير آلية الامتصاص من خلال تحول حفرة الكمون المكعبة إلى حفرة كمون متوازي مستطيلات لأن النموذج النظري يعتمد على أبعاد النقط الكمومية في حين لا يعتمد تجريبياً على أبعادها لأن النقط الكمومية هي الحالة المتوسطة بين الجزيئات والبنية البلورية، إذ تمتص فوتونات من جميع الطاقات التي تزيد عن عتبة فجوة الطاقة لكن الطول الموجي يعتمد بشكل رئيسي على أبعاد تلك النقطة الكمومية.

## المراجع:

1. L. E. BRUS, "Lifetime Studies of Na(32P) and Tl(72S) produced by Photodissociation and Quenched by Halogens," *J. Chem. Phys.* 52, 1716 (1970)
2. R. Rossetti, S. Nakahara and L. E. Brus, *J. Chem. Phys.*, Vol. 79, 1086–1088 (1983).
3. Richard J. Byers, Elizabeth R. Hitchman, *Quantum Dots Brighten Biological Imaging Review Article progress in Histochemistry and cytochemistry*, Volume 45, Issue 4, 2011
4. N. Vukmirovic and L-W Wang, "Quantum Dots Theory" 2011
5. IGOR. MEDINTZ, H. TETSUO UYEDA, ELLEN R. GOLDMAN and HEDI MATTOUSSI *Quantum dot bioconjugates for imaging, labelling and sensing nature materials* |Vol 4| JUNE 2005 , page 436
6. *Interdot interactions and band gap changes in CdSe nanocrystal arrays at elevated pressure JOURNAL OF APPLIED PHYSICS VOLUME 89, NUMBER 1215 JUNE 2001*
7. IGOR L. MEDINTZI, H. TETSUO UYEDA, ELLEN R. GOLDMAN AND HEDI MATTOUSSI *Quantum dot bioconjugates for imaging, labelling and sensing nature materials* \ VOL4 \ JUNE 2005 \ WWW.NATURE.COM/NATUREMATERIALS
8. Ivan A. Avrutsky, Alexey V. Vosmishev. *Calculation of exciton suppression in quantum well field by 2D electron gas and resultant modification spectra, Moscow 2021.*