



بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۸ تا ۱۰ بهمن ماه ۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز



تأثیر درصد استوکیومتری بر ترازهای انرژی نقطه کوانتومی هرمی شکل $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ مبتنی بر GaAs

مهدی احمدی برجی، اسفندیار رجایی و کاوه کیهانی
دانشکده فیزیک، دانشگاه گیلان، رشت

چکیده- در این مقاله، لبه نوار و ترازهای انرژی نقاط کوانتومی هرمی شکل $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ روی زیرلایه GaAs بررسی نموده ایم. نشان می-دهیم که با تغییرات درصد استوکیومتری In نسبت به Ga در نقطه کوانتومی مقادیر مجاز انرژی در نقاط افزایش یافته و لبه نوارهای هدایت و رسانش به هم نزدیک تر می شوند و همچنین طول موج گسیلی نور از ترازها افزایش می یابد. نتایج ما بسیار با نتایج تجربی و تئوری های پیشین سازگار هستند.

کلیدواژه- کرنش، لبه نوار، نانوالکترونیک، نقاط کوانتومی

Effect of indium percentage on energy levels of pyramidal $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ quantum dots on GaAs substrate

Mahdi Ahmadi Borji, Esfandiar Rajaei and Kaveh Kayhani

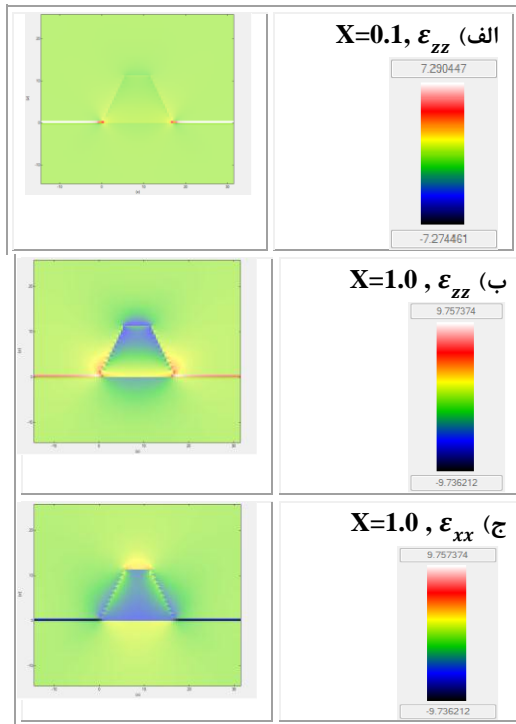
University of Guilan, Namjoo street, Rasht, Iran

Abstract- In this paper, we have studied the bandedge and energy levels of pyramidal InGaAs based quantum dots (QDs) surrounded by GaAs. We show that by changing the In ratio rather than Ga in the QD, not only the allowed energy states increase, but also the conduction and valence bandedges get closer to each other. We even show that the radiation wavelength get longer. Our results appear to coincide with former researches.

Keywords: Strain, bandedge, nano-electronics, quantum dots

۱- مقدمه

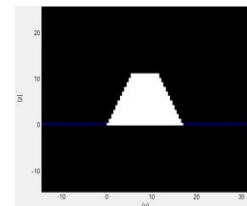
قطبشی می‌شود و بارهای قطبشی باعث القای میدان الکتریکی می‌شوند. این میدان باعث می‌شود تا ترازهای انرژی شیب گرفته و الکترون‌ها و حفره‌ها به دو سوی مخالف حرکت کنند.



ادوات نوری نانوساختار نیم‌رسانا به علت مزایای بسیاری که نسبت به ادوات نوری پیشین دارند بسیار مورد توجه هستند روشهای تجربی مختلفی برای ساخت ناحیه فعال این ادوات به کار می‌روند که در این میان روش خودسالماتی یک روش بهینه در ساخت نقاط کوانتومی به شمار می‌آید مدل‌های تئوری به کار رفته برای مدل کردن این روش نشان می‌دهند که می‌توان نقاط به وجود آمده را که اندازه و شکل تصادفی دارند به شکل‌های هرمی، عدسی‌گونه، استوانه‌ای و ... مورد مطالعه قرار داد [1]. به ویژه لیزرهای نقطه کوانتومی InGaAs/GaAs در صنعت امروز کاربرد فراوان دارند طول موج ساطع شده از نقاط کوانتومی به اختلاف ویژه مقادیر مجاز انرژی برای الکترون‌ها و حفره‌ها بستگی دارد بنابراین برای مطالعه بیشتر لیزردهی این ادوات به بررسی ترازهای انرژی آنها پرداخته‌ایم در صورتی که بتوان راهی برای کوچکتر کردن نقاط و در نتیجه دست یافتن به چگالی بالاتری از آنها پیدا کرد، کارایی لیزر نقطه کوانتومی بیشتر می‌شود لذا سعی کردیم تا حالت‌های مجاز الکترونی در نقاط را با درصدهای استوکیومتری مختلف بررسی نموده و در نهایت یک اندازه درصد استوکیومتری بهینه پیشنهاد دهیم در این تحقیق، نوارهای انرژی هدایت و ظرفیت نقطه کوانتومی هرمی شکل InGaAs بر مبنای GaAs را به همراه ویژه مقادیر انرژی آن به دست آوردیم این کار را با حل معادله شرودینگر و استفاده از Nextnano⁺⁺ [2] انجام دادیم [3].

۲- نتایج و بحث و بررسی

شکل ۱ نمای جانبی ساختار نقطه کوانتومی هرمی شکل InGaAs با قاعده مربعی به مساحت $17nm \times 17nm$ و ارتفاع $\frac{2}{3}$ برابر پهنای قاعده را در روی لایه $15nm - GaAs$ با لایه ترکندنده به ضخامت $0.5nm$ نشان می‌دهد. این ساختار با شاخص (001) از زیرلایه GaAs رشد داده شده است.

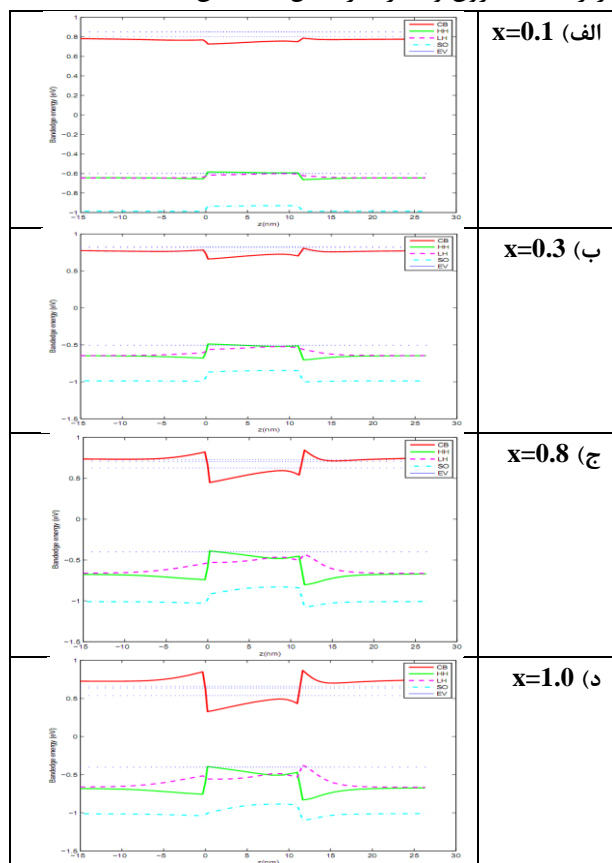


شکل ۱. ساختار هرمی نقطه کوانتومی InGaAs/GaAs همراه با لایه ترکندنده

شکل ۲ الف و ب نمودارهای عنصر ϵ_{zz} در تانسور کرنش را در صفحه xy در دو مقدار آرایش x نمونه نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود به علت عدم تطابق ثابت شبکه بین InGaAs و GaAs، نقطه کوانتومی دچار کرنش تراکمی می‌شود تا ثابت‌های شبکه در سطح مشترک بر هم منطبق شوند [۴] و لذا جابجایی مراکز بارهای مثبت و منفی باعث شکل‌گیری بارهای

شکل ۲. نمودار کرنش در صفحه xz برای مقادیر مختلف درصد استوکیومتری. در آرایش کم عنصر In کرنش در اکثر نقاط نمونه مقادیری کوچک دارد و تنها در گرما و روی لایه ترکندنده قبل توجه است (شکل ۲-الف). با افزایش نسبت In بر مقدار مطلق کرنش افزوده شده و همچنین کرنش‌های مثبت و منفی نیز به خوبی خود را نشان داند (شکل ۲-ب). همچنین کرنش ϵ_{xx} را نیز در شکل ۲-ج نشان دادیم علاوه بر این، شکل ۳ عناصر مختلف تانسور ϵ_{ij} را در آرایش‌های متفاوت در جهت رشد Z نمایش می‌دهد در این شکل مقادیر ϵ_{11} و ϵ_{22} روی هم افتادند و ϵ_{13} و ϵ_{23} نیز روی هم افتادند مشاهده می‌شود که با افزایش آرایش In مقدار کرنش افزایش یافته است در شکل ۴ ساختار لایه نوارهای هدایت و ظرفیت را در صفحه xz در دمای $300K$ و درصد استوکیومتری $In_{0.1}Ga_{0.9}As/GaAs$ را با درصد استوکیومتری $In_{1.0}Ga_{0.0}As/GaAs$ مقایسه کردیم رنگ قرمز نشان‌دهنده مقلد انرژی بیشتر و رنگ بنفش نشان‌دهنده مقلد انرژی کمتر است. در شکل ۵-الف ساختار لایه نوارهای هدایت و ظرفیت را در جهت رشد و همچنین سه ویژه مقدار اولیه انرژی برای الکترون‌ها و اولین، دهمین و پانزدهمین ویژه مقادیر انرژی برای حفره‌ها در دمای $300K$ و درصد استوکیومتری $In_{0.1}Ga_{0.9}As/GaAs$ نشان دادیم همان‌گونه که از شکل پیداست هیچ یک از ویژه مقادیر مجاز

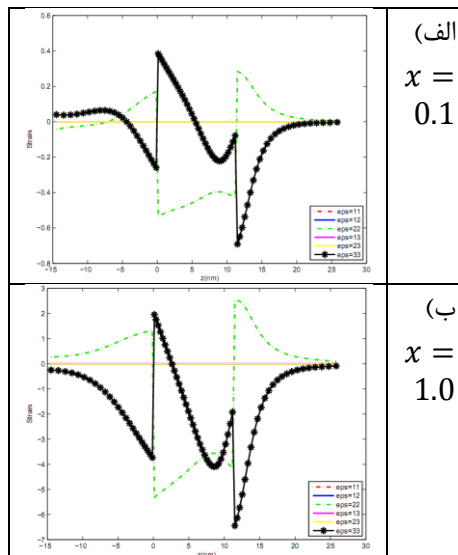
با افزایش درصد ایندیم و به موازات آن کاهش مقدار گالیم می‌بینیم که تعداد ترازهای بیشتری در داخل QD قرار می‌گیرند که بنابراین در این حالت شامل تراز ES نیز خواهد بود. لذا در این حالت انتظار داریم که طول موج‌های بازترکیب مختلفی از QD دریافت کنیم. نه تنها افزایش تعداد حالت‌ها، جابجایی ترازهای انرژی نیز در این روند افزایش ایندیم قابل توجه و بسیار جالب است. به خوبی دیده می‌شود که کاهش مقدار گالیم در QD، موجب کاهش گاف نوار انرژی می‌شود. گذارهای مختلف در بازترکیب الکترون و حفره در شکل ۶ نمایش داده شده‌اند.



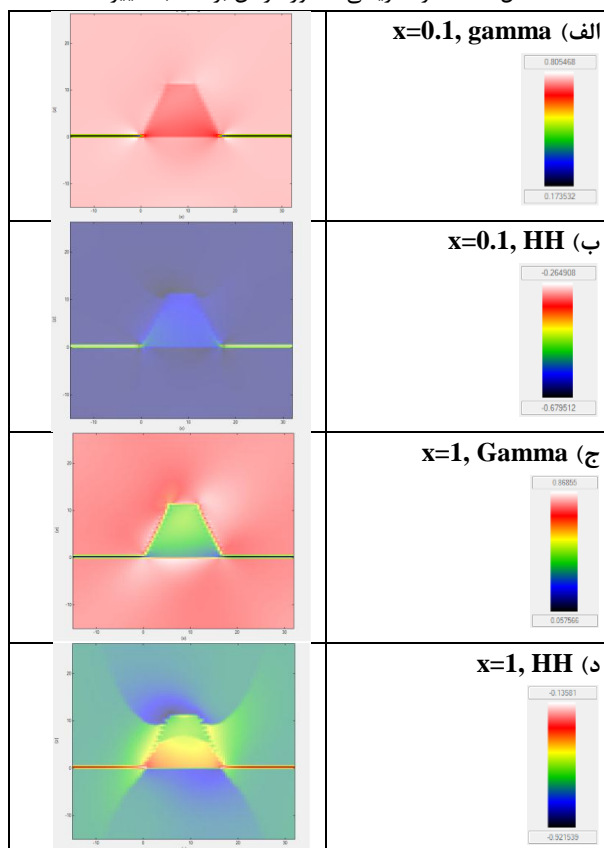
شکل ۵. ساختار لبه نوارهای انرژی هدایت و ظرفیت و ترازهای انرژی نوار هدایت و ظرفیت در دمای 300K.

در شکل ۷ همچنین اختلاف اولین ویژه‌مقادیر مجاز انرژی را برای الکترون و حفره برحسب تغییرات درصد x نمایش داده‌ایم. این مقدار که نشان دهنده انرژی تابش شده از لیزر نقطه کوانتومی است با افزایش مقدار x کاهش یافته و لذا طول موج فوتون‌های لیزر افزایش می‌یابد.

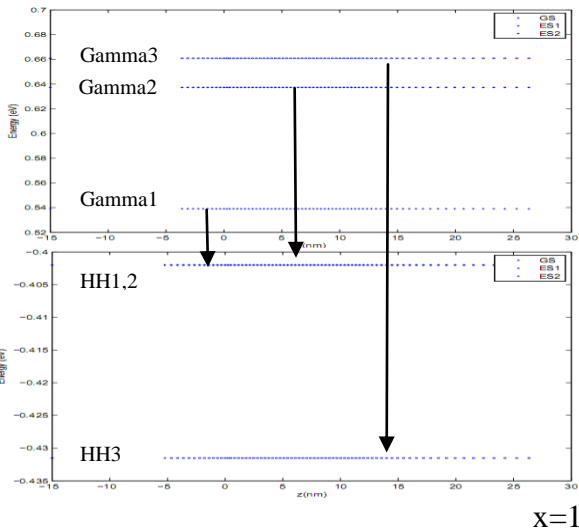
انرژی در داخل نقطه کوانتومی قرار نگرفته‌اند در شکل ۵-ب مقدار درصد آلیش ایندیم را به $x = 0.3$ افزایش دادیم مشاهده می‌شود که یکی از ترازها در داخل نقطه می‌افتد این تراز همان تراز حالت پایه GS است و در این حالت تراز برانگیخته (ES) خارج از نقطه است.



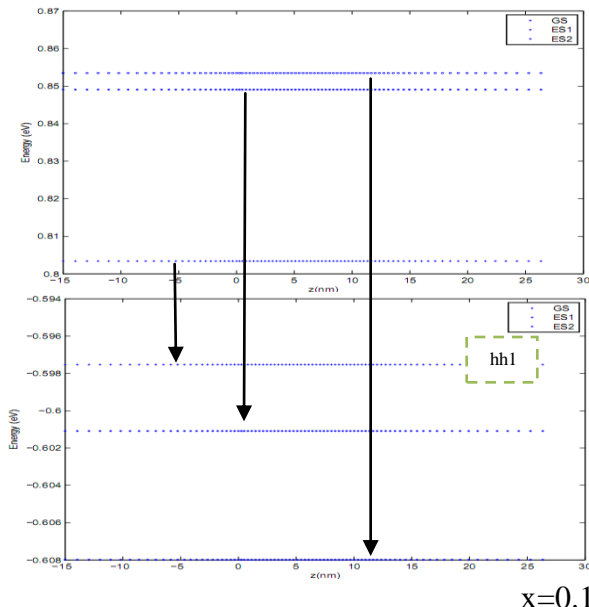
شکل ۳. عناصر ماتریسی تانسور کرنش بر حسب تغییرات Z.



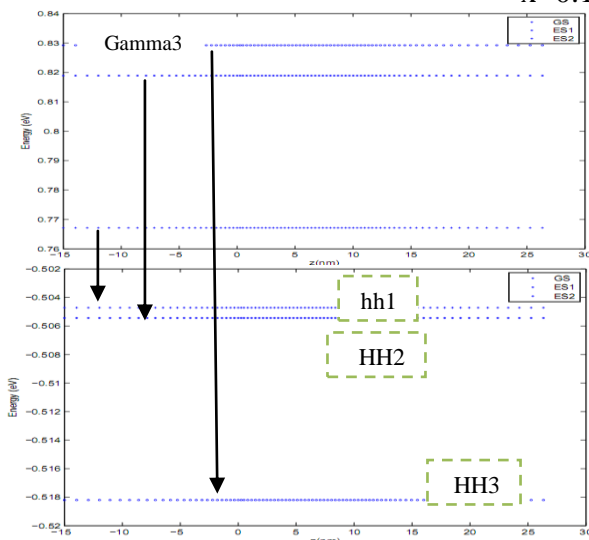
شکل ۴. ساختار لبه نوارهای هدایت و ظرفیت در صفحه XZ متقاطع با مرکز نقطه کوانتومی در دمای $T = 300K$



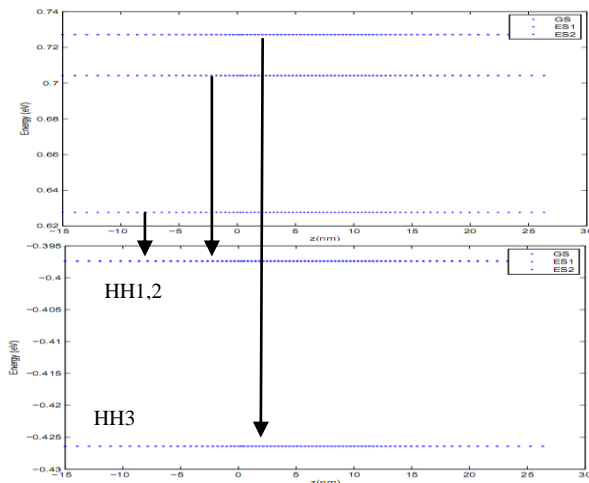
شکل ۶. بازترکیب‌های مختلف الکترون و حفره



x=0.1

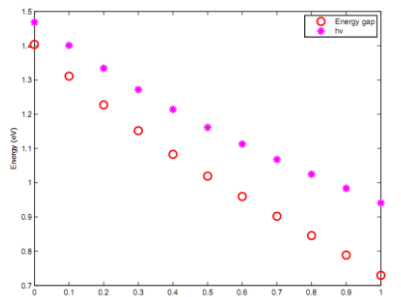


x=0.3



x=0.8

شکل ۷. انرژی بازترکیب الکترون حفره و گاف نوار بر حسب تغییرات X.



گاف انرژی که به صورت اختلاف لهنوار هدایت و ظرفیت تعریف می‌شود با دایره‌های کوچک نشان داده شده است. از شکل مشخص است که با افزایش X انرژی گاف کاهش یافته است. اما این که اختلاف انرژی گاف و انرژی فوتون تبلیسی دارای دو شیب مختلف هستند نشان از این دارد که هر چه درصد ایندیم بیشتر شود ترازهای مجاز انرژی فاصله بیشتری نسبت به لبه نوار می‌گیرند. خواهیم بود.

مرجع‌ها

- [1] Self-assembled quantum dots, Zhiming M. Wang, Springer, 2008
- [2] <http://www.nextrano.com/nextranoplus>
- [3] Trelkakis, A. et al. Te 3D nanometer device project nextrano: Concepts, methods, results. J. Comput. Electronics 5, 285– 289 (2006).
- [4] Bimer, S. et al. nextrano: General purpose 3-D simulations. IEEE T. Electron Dev. 54, 2137– 2142 (2007).
- [5] S. Pereira, M.R. Correia, E. Pereira, C. Trieger-Cowan, Phys. Lett., Vol. 81, No. 7 (2002).
- [5] IEEE JOURNAL OF QUANTUM ELECTRONICS, VOL. 42, NO. 3, MARCH (2006).
- [4] Band-edge diagrams for strained III-V semiconductor quantum wells, wires, and dots, C.E. Pryor, M.-E. Pistol (2008)
- [5] Numerical Simulation of Quantum Dots, Marta Markiewicz
- [6] Self-organization in strained heteroepitaxial nanostructures: multi-scale modeling, simulation and experiment, A. F. Bower, E. Chason, L. B. Freund and V. B. Shenoy
- [7] Strain distribution and electronic spectra of InAs/GaAs self-assembled dots: An eight-band study, Phys. Rev. B, VOLUME 56, NUMBER 8 (1997).
- [10] Bernhard Groz, Moritz V. Hauf, Markus Dankerl, Boris naydenov, Sébastien Pezzagna, Jan meijer, Fedor Jelezko, Jörg Wrachtrup, Martin Stutzmann, Friedemann Reinhard & Jose A. Gamido, "Charge state manipulation of qubits in diamond", Nature Communications, Vol. 10, 10388 (2012).