ضریب جذب نوری در چاه‌های کوانتومی کرنشی دوگانه ZnO/MgZnO

مهناز مجاب آبپرده، محمد جواد کریمی، سید مهدی حسینی

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شیراز، شیراز

چکیده - در این مقاله، ضریب جذب نوری کل در چاه‌های کوانتومی کرنشی دوگانه ZnO/MgZnO مطالعه می‌شود. اثرات پهنای سد و غلظت منیزیم بر روی ضریب جذب نوری کل مورد بررسی قرار می‌گیرند. نتایج نشان می‌دهند که با افزایش پهنای سد قله تشدید ضریب جذب نوری کل افزایش می‌یابد و به سمت مقادیر انرژی فوتون فرودی کمتر جابجا می‌شود. همچنین، با افزایش غلظت منیزیم اندازه قله‌های تشدید ضریب جذب نوری کل کاهش می‌یابد و مکان آن‌ها به سمت انرژی‌های فوتونی بیشتر می‌رود.

Optical Absorption Coefficient of Strained ZnO/MgZnO Double Quantum Wells

Mahnaz Mojab Abpardeh, Mohammad Javad Karimi, Seyyed Mehdi Hosseini

College of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz

Abstract- In this paper, the total optical absorption coefficient in strained ZnO/MgZnO double quantum wells is studied. The effects of Mg concentration and barrier width on the total optical absorption coefficient are investigated. Results show that with increasing barrier width, the resonant peak of the total optical absorption coefficient increases and shifts to the lower values of the incident photon energy. Moreover, with increasing Mg concentration, the peaks of the total optical absorption decrease and their places shift to the higher values of photon energy.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]

۱- مقدمه

چاه‌های کوانتومی که از نیم‌رساناهای دارای ساختار شش گوشه‌ای ساخته شده‌اند، از جهت کاربردهای ابزاری از قبیل LEDهای فرابنفش، آبی و سبز، دایود لیزرها، آشکارسازهای نوری و کلیدزن‌های تمام نوری توجهات بسیاری را جلب کرده‌اند [۱]. در این میان می‌توان به ترکیبات ZnO, CdS, CdSe, GaN,... اشاره کرد که ZnO بدلیل مزایایی مانند دمای رشد پایین، غیرسمی بودن، مقاومت بالا نسبت به شدت تابش، هزینه کمتر و تکنولوژی ساده‌تر جهت رشد بیشتر مورد توجه قرار گرفته است [۲و۳]. ZnO از لحاظ خواص ساختاری، الکتریکی، اپتیکی و پیزوالکتریکی دارای سه ساختار شش گوشه ای، سنگ نمکی(NaCl) و سولفیدروی(Zincblende) با انرژی گاف نواری مستقیم ۳/۳۷ ev، انرژی اکسیتون ۶۰ Mev و انرژی فعال‌سازی دمایی ۲۵ Mev در دمای اتاق است که از میان این سه ساختار، تنها ساختار شش گوشه‌ای در دمای اتاق پایدار است. ZnO بدلیل گاف نواری عریض در محدوده مرئی یک ماده شفاف محسوب می‌شود و به عنوان اکسید رسانای شفاف (TCO) طبقه‌بندی می‌شود. همچنین، ZnO جز مواد پیزوالکتریک قرار می‌گیرد که خواص پیزوالکتریک غیرهمسان آن بدلیل ساختار بلوری آن می‌باشد که دارای عدم تقارن مرکزی است. بنا به خواص منحصر بفرد ذکر شده، از ZnO می‌توان در ساخت ابزارهای اپتوالکترونیکی فرابنفش مانند آشکارسازهای فرابنفش، LEDها و دایود لیزرها، ابزارهای اپتیکی طول موج کوتاه، ابزارهای فتونیکی که در ناحیه فرابنفش و نور مرئی کار می‌کنند، سلول‌های خورشیدی، حسگرهای گازی، نانولیزرهای فرابنفش، آشکارسازهای نوری و ابزارهای پیزوالکتریک استفاده کرد [۴]. بواسطه عناصری مانند Mg, Cd, Be ترکیبات سه تایی و بنابراین، نانوساختارهای کوانتومی مبتنی بر ZnO خواهیم داشت. یکی از خصوصیات اساسی این نانوساختارها وجود میدان الکتریکی داخلی قوی از مرتبه MV/cm حاصل از قطبش-های خودبخودی و پیزوالکتریک است. از دهه گذشته کار بر روی نانوساختارهای کوانتومی مبتنی بر ZnO شروع شده است و اخیرا محققان بسیاری بصورت تجربی و تئوری به بررسی پدیده‌های مختلف پرداخته‌اند: تیسیر و همکارانش اثر فشار هیدروستاتیک بر روی میدان الکتریکی داخلی در چاه کوانتومی ZnO/ZnMgO را بررسی کردند و دریافتند که با افزایش فشار میدان نیز افزایش می‌یابد [۵]. ژاوو و همکارانش جذب زیرباندی فروسرخ میانی در دمای اتاق را مشاهده کردند [۶]. چیاریا و همکارانش به مطالعه عددی LEDهای مبتنی بر ZnO پرداختند [۷].

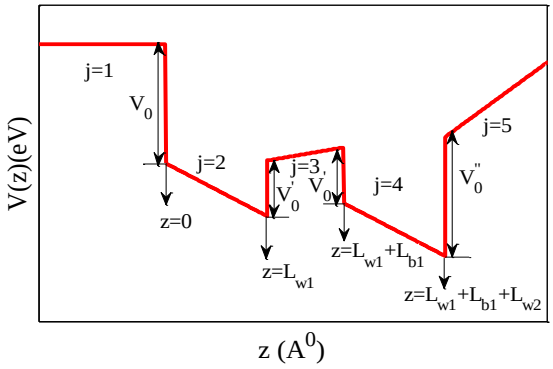
بدلیل اهمیت خواص نوری ترکیبات ZnO و کاربردهای ذکر شده آن‌ها در ساخت ادوات اپتوالکترونیکی، ما در این مقاله به بررسی اثر غلظت منیزیم و پهنای سد بر روی ضریب جذب نوری چاه کوانتومی کرنشی دوگانه ZnO/ZnMgO می‌پردازیم.

۲- مبانی نظری

یک چاه کوانتومی نشان داده شده در شکل۱ با ساختار $Mg_{0.34}Zn_{0.66}O / ZnO / Mg_xZn_{1-x}O / ZnO / Mg_{0.34}Zn_{0.66}O$ در نظر می‌گیریم. لایه ها در جهت محور z بر روی زیرلایه ضخیم $Mg_{0.34}Zn_{0.66}O$ رشد می‌کنند. در هرلایه از ساختار (چاه‌ها وسدها) میدان الکتریکی داخلی از رابطه زیر حاصل می‌شود [۸]:

$$F_j = \frac{\sum_k (P_k - P_j)(L_k/\varepsilon_k)}{\varepsilon_j \sum_k (L_k/\varepsilon_k)} \qquad (۱)$$

در رابطه (۱)، ε، L و P بترتیب بیانگر ثابت دی الکتریک، طول سد یا چاه و قطبش کل است. جزئیات محاسبه قطبش کل در مراجع [۹و۱۰] آمده است.



شکل۱ : نمایه ای از پتانسیل تحدید بر حسب مکان

با در نظر گرفتن تقریب جرم موثر، معادله شرودینگر مستقل از زمان در یک بعد طبق رابطه زیر نوشته می‌شود:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\left[\frac{1}{m^*(z)}\frac{d\psi(z)}{dz}\right] + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \qquad (۲)$$

جرم موثر و پتانسیل تحدید نواحی بصورت زیر می‌باشند:

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]

$$m^*,V(z)=\begin{cases} m_s^*,V_0 & j=1 \\ m_w^*,eF_{w_1}z & j=2 \\ m_b^*,eF_{w_1}L_{w_1}+eF_{b_1}\left(z-L_{w_1}\right)+V_0' & j=3 \\ m_w^*,eF_{w_1}L_{w_1}+eF_{b_1}L_{b_1}+ & j=4 \\ eF_{w_2}\left[z-\left(L_{w_1}+L_{b_1}\right)\right] & \\ m_s^*,eF_{w_1}L_{w_1}+eF_{b_1}L_{b_1}+eF_{w_2}L_{w_2} & j=5 \\ +eF_{b_2}\left[z-\left(L_{w_1}+L_{b_1}+L_{w_2}\right)\right]+V_0'' & \end{cases} \quad (۳)$$

پاسخ تحلیلی معادله شرودینگر نواحی بصورت زیر است:

$$\psi(z)=\begin{cases} C_1\exp(k_1z)+D_1\exp(-k_1z) & j=1 \\ C_jAi\left(k_j(z)\right)+D_jBi\left(k_j(z)\right) & j=2,3,4,5 \end{cases} \quad (۴)$$

به گونه‌ای که

$$k_1=\left(\frac{2m_s^*\left(V_0-E\right)}{\hbar^2}\right)^{1/2} \quad (۵)$$

$$k_j(z)=\left(\frac{\hbar^2e^2F_j^2}{m_j^*}\right)^{-1/3}\left[V_j(z)-E\right] \quad (۶)$$

با استفاده از روش ماتریس انتقال و اعمال شرایط مرزی ضرایب توابع موج به وسیله ۸ ماتریس به یکدیگر مرتبط می‌شوند [۸و۱۱]. با انجام پاره‌ای محاسبات [۱۲]، رابطه زیر حاصل می‌شود:

$$\begin{bmatrix} C_1 \\ D_1 \end{bmatrix}=M_1^{-1}M_2M_3^{-1}M_4M_5^{-1}M_6M_7^{-1}M_8\begin{bmatrix} C_5 \\ D_5 \end{bmatrix}=M^T\begin{bmatrix} C_5 \\ D_5 \end{bmatrix} \quad (۷)$$

که M^T یک ماتریس 2×2 می‌باشد.

با توجه به این نکته که توابع موج در بینهایت به سمت صفر میل می کنند، ضرایب D_1 و D_5 باید صفر باشند. بنابراین، طبق روابط (۹) و (۱۰)، رابطه زیر بدست می‌آید:

$$\begin{cases} C_1=M_{11}^T\times C_5 \\ 0\ =M_{21}^T\times C_5 \end{cases} \quad (۹)$$

طبق رابطه(۹) و با توجه به اینکه مولفه های ماتریس M^T تابعی از ویژه مقادیر انرژی هستند، با حل معادله $M_{21}^T(E)=0$ ویژه مقادیر انرژی و سپس مولفه های ماتریس های M بدست خواهند آمد. در نهایت، مقادیر ضرایب توابع موج با بهنجارش توابع موج حاصل خواهند شد. پس از بدست آمدن توابع موج نهایی و محاسبه ویژه مقادیر انرژی متناظر، ضرایب جذب نوری با بهره گیری از روش ماتریس چگالی [۹] بدست می‌آیند. ضرایب جذب نوری خطی (مرتبه اول) و غیر خطی (مرتبه سوم) بصورت زیر می‌باشند:

$$\alpha^{(1)}(\omega)=\omega\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_R}}\frac{|M_{21}|^2\sigma_v\hbar\Gamma_{12}}{\left(E_{21}-\hbar\omega\right)^2+\left(\hbar\Gamma_{12}\right)^2} \quad (۱۰)$$

$$\alpha^{(3)}(\omega,I)=-\omega\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_R}}\left(\frac{I}{2\varepsilon_0n_rc}\right)\frac{|M_{21}|^2\sigma_v\hbar\Gamma_{12}}{\left[\left(E_{21}-\hbar\omega\right)^2+\left(\hbar\Gamma_{12}\right)^2\right]^2}\times \left[4|M_{21}|^2-\frac{|M_{22}-M_{11}|^2\left[3E_{21}^2-4E_{21}\hbar\omega+\hbar^2\left(\omega^2-\Gamma_{12}^2\right)\right]}{E_{21}^2+\left(\hbar\Gamma_{12}\right)^2}\right] \quad (۱۱)$$

و ضریب جذب کل طبق رابطه زیر نوشته می‌شود:

$$\alpha(\omega,I)=\alpha^{(1)}(\omega)+\alpha^{(3)}(\omega,I) \quad (۱۲)$$

در روابط (۱۰) و (۱۱)، σ_v چگالی حامل، $\Gamma_{12}=1/T_{12}$ آهنگ گذار، $n_r=\sqrt{\varepsilon_R/\varepsilon_0}$ ضریب شکست، ε_R قسمت حقیقی ثابت گذردهی الکتریکی، I شدت میدان الکترومغناطیسی، μ ثابت تراوایی و c سرعت نور در فضای آزاد می‌باشد.

E_{21} و M_{ij} (اختلاف انرژی حالت ها و مولفه های ماتریس تکانه دوقطبی) طبق روابط زیر محاسبه می‌شوند:

$$E_{21}=\frac{E_2-E_1}{\hbar} \quad (۱۳)$$

$$M_{ij}=e\int\psi_i^*(z)z\psi_j(z)dz \quad (۱۴)$$

۱-۲- بحث، جدول و نمودارها

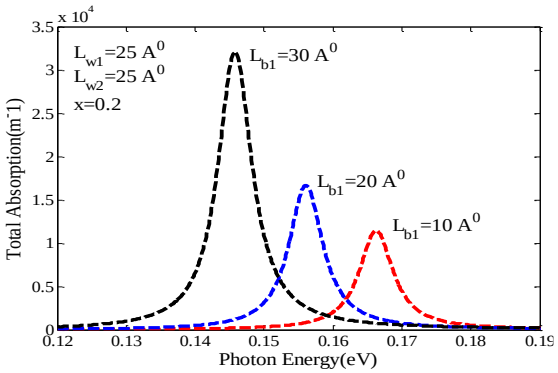
پارامترهای ماده در جدول (۱) آمده است و سایر پارامترها نیز عبارتند از: $I=0.2\ \mu w/cm^2$، $\sigma_v=3\times10^{22}\ m^{-1}$، $T_{12}=0.24\ ps$ و $\mu=4\pi\times10^{-7}\ Hm^{-1}$.

جدول۱: پارامترهای ماده مورد استفاده در محاسبات [۷]

Parameter	$Mg_xZn_{1-x}O(0\le x\le0.4)$
$a(A^o)$	$3.25+0.05x$
$E_g(eV)$	$3.373+1.046x+0.87x^2$
$m_e^{\square}$	$0.23+0.05x$
$c_{13}(GPa)$	104
$c_{33}(GPa)$	216
ε	$8.1+1.5x$
$e_{13}(cm^{-2})$	$-0.53+0.15x$
$e_{33}(cm^{-2})$	$1.19+1.07x$
$p^{sp}(cm^{-2})$	$-0.057-0.064x$

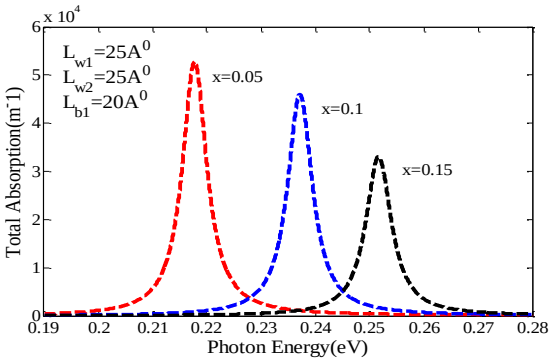
این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]



شکل۲ : ضریب جذب نوری کل بر حسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف پهنای سد.

تغییرات ضریب جذب نوری کل بر حسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف پهنای سد در شکل۲ رسم شده است. با افزایش پهنای سد اندازه میدان‌های پیزوالکتریک F_w و F_b کاهش می‌یابند، که این منجر به کاهش پتانسیل تحدید نیز می‌شود. بنابراین، اختلاف انرژی ترازها (E_{21}) کاهش می‌یابد و عنصر گشتاور دوقطبی الکتریکی (M_{21}) افزایش می‌یابد. مکان قله‌ها به E_{21} و اندازه آن‌ها به $E_{21}|M_{21}|^2$ بستگی دارد که در اینجا تغییرات M_{21} غالب می‌باشد. بنابراین، اندازه قله‌ها افزایش یافته و به سمت انرژی فوتونی کمتر جابجا می‌شوند.



شکل۳: ضریب جذب نوری کل بر حسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف غلظت منیزیم.

در شکل۳ ضریب جذب نوری کل بر حسب انرژی فوتون فرودی برای سه مقدار مختلف غلظت منیزیم رسم شده است. با افزایش غلظت منیزیم قطبش‌های خوبخودی و پیزوالکتریک و در نتیجه قطبش کل افزایش می‌یابد و طبق رابطه(۱) میدان الکتریکی داخلی افزایش می یابد. در نتیجه پتانسیل تحدید کوانتومی افزایش می‌یابد که این منجر به افزایش E_{21} و کاهش M_{21} می‌شود. بنابراین، با افزایش غلظت منیزیم اندازه قله ضریب جذب نوری کل نیز مشابه M_{21} کاهش می یابد و قله‌ها به سمت انرژی‌های فوتونی بیشتر می‌روند.

۳- نتیجه‌گیری

ما در این مقاله، با استفاده از روش ماتریس انتقال ساختار الکترونیکی چاه کرنشی کوانتومی دوگانه ZnO/MgZnO را بدست آوردیم. سپس با استفاده از روش ماتریس چگالی ضرایب جذب نوری این سیستم را محاسبه کردیم. نتایج نشان می‌دهند که با افزایش ضخامت لایه سد قله ضریب جذب نوری به سمت انرژی‌های کمتر جابجا می‌شود و اندازه آن افزایش می‌یابد. در حالیکه، با افزایش غلظت منیزیم قله‌ها به سمت انرژی‌های بیشتر جابجا می‌شوند و اندازه آنها کاهش می‌یابد.

مراجع

[1] J. Zhu, S. L. Ban, S. H. Ha, "A simulation of intersubband absorption in $ZnO/Mg_xZn_{1-x}O$ quantum wells with an external electric field", Superlatt. Microstruct, Vol. 56, pp. 92-98, 2013.

[2] J. Davis, C. Jagadish, "ZnO/MgZnO quantum wells", *In GaN and ZnO-based Materials and Devices*, Springer Berlin Heidelberg, pp. 413-434, 2012.

[3] J. C. Fan, S. L. Chang, Z. Xie, J. M. Ballato, "ZnO-based light-emitting diodes"; *INTECH Open Access Publisher*, 2013.

[4] K. Nomura, H. Ohta, K. Ueda, T. Kamiya, M. Hirano, H. Hosono, "Thin-Film Transistor Fabricated in Single-Crystalline Transparent Oxide Semiconductor", Science, Vol. 300, pp. 1269-1272, 2003.

[5] H. Teisseyre, A. Kaminska, S. Birner, T. D. Young, A. Suchocki, A. Kozanecki, "Influence of hydrostatic pressure on the built-in electric field in ZnO/ZnMgO quantum wells", J. Appl. Phys. *Vol. 119*, pp. 1-8, 2016.

[6] K. Zhao, G. Chen, B. S. Li, A. Shen, "Mid-infrared intersubband absorptions in ZnO/ZnMgO multiple quantum wells", Appl. Phys. Lett, Vol. 104, pp. 1-4, 2014.

[7] S. Chiaria, M. Goano, E. Bellotti, "Numerical study of ZnO-based LEDs", IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 47, No. 5, pp. 661-671, 2011.

[8] P. Harrison, "*Quantum Wells, Wires and Dots*", 2nd ed, Wiley, New York, 2006.

[9] M. J. Karimi, H. Vafaei; "Intense laser field effects on the linear and nonlinear intersubband optical properties in a strained InGaN/GaN quantum well", Physica B, Vol. 452, pp. 131–135, 2014.

[10] M. J. Karimi, H. Vafaei, "Second-order nonlinear optical properties in a strained InGaN/AlGaN quantum well under the intense laser field", Superlatt. Microstruct, Vol. 78, pp. 1–11, 2015.

[11] H. Wang, H. Xu, Y. Zhang, "Indispensable factors influence the quasi-bound levels of biased multi-barrier quantum well structures", Phys. Lett. A , Vol. 340, pp. 347–354, 2005.

[12] S. Usefzadeh, M. J. Karimi, "Electromagnetically induced transparency in the strained quantum wells: Effects of structural parameters and geometrical size", Optik-International Journal for Light and Electron Optics, Vol. 127, No. 21, pp. 10208-10215, 2016.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]