

تاثیر درصد استوکیومتری بر ترازهای انرژی نقطه کوانتومی هرمی شکل In_xGa_{1-x}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 In_xGa_{1-x}As روی زیرلایه GaAs بررسی نمودهایم. نشان مـی-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 میشوند و همچنین طول موج گسیلی نور از ترازها افزایش مییابد. نتایج ما بسیار بـا نتـایج تجربـی و تئـوریهـای پیشین سازگار هستند.

كليدواژه- كرنش، لبه نوار، نانوالكترونيك، نقاط كوانتومي

Effect of indium percentage on energy levels of pyramidal $In_xGa_{1-x}As$ 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

ادوات نوری نانوساختار نیمرسانا به علت مزایای بسیاری که نسبت به ادوات نوری پیشین دارند بسيار مورد توجه هستند، روشهاي تجربي مختلفي براي ساخت ناحيه فعال اين ادوات به کار میروند که در این میان روش خودسامانی یک روش بهینه در ساخت نقاط کوانتومی به شمار می آید مدل های تئوری به کار رفته برای مدل کردن این روش نشان می دهند که می توان نقاط به وجود آمده را که اندازه و شکل تصادفی دارند به شکلهای هرمی، عدسی گونه، 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 نقلط کوانتومی به اختلاف ویژه مقادیر مجاز انرژی برای الکترونها و حفرمها 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 می شود. لذا سعی کردهایم 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 آوردهایم این کا را با حل معادله شرودينگر و استفاده از "Nextnano [2] انجام دادهايم [3].

۲- نتایج و بحث و بررسی

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

شكل ۱. ساختار هرمی نقطه كوانتومی

InGaAs/GaAs همراه با لایه ترکننده



شکل ۲ الف و ب نمودارهای عنصر z_{ZZ} در تانسور کرنش را در صفحه Xy در دو مقدار آلایش x نمونه نشان می دهد. همان-طور که مشاهده می شود به علت عدم تطابق ثابت شبکه بین امور که مشاهده می شود به علت عدم تطابق ثابت شبکه بین تا ثابتهای شبکه در سطح مشترک بر هم منطبق شوند [*]و لذا جابجایی مراکز بارهای مثبت و منفی باعث شکل گیری بارهای

قطبشی می شود و بارهای قطبشی باعث القای میدان الکتریکی می شوند. این میدان باعث می شود تا ترازهای انرژی شیب گرفته و الکترون ها و حفرهها به دو سوی مخالف حرکت کنند.



شکل ۲. نمودار کرنش در صفحه XZ برای مقادیر مختلف درصد استوکیومتری. در آلایش کم عنصر In کرنش در اکثر نقاط نمونه مقداری کوچک دارد و تنها در گرمها و روی لایه ترکننده قلبل 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 دادماند (شکل ۲-ب). همچنین کرنش ۲۲۶ را نیز در شکل ۲-ج نشان دادمایم علاوه بر این، شکل ۳ عناصر مختلف تلسور ε_{ii} را در آلایش های متفاوت در جهت رشد Z نمایش می دهد. در این شکل مقادیر \mathcal{E}_{12} و \mathcal{E}_{22} روی هم افتلاماند و مقدار In مقدار وی هم افتلاماند. مشاهده می شود که با افزایش آلایش In مقدار ${\mathcal E}_{23}$ ${\mathcal E}_{13}$ کرنش افزایش یافته است. در شکل ۴ ساختار لبه نوارهای هدایت و ظرفیت را در صفحه XZ در دمای 300K و درصد استوکیومتری In_{0.1}Ga_{0.9}As/GaAsرا با درصد استوکیومتری In1.0Ga0.0As/GaAsمقایسه کردهایم. رنگ قرمز نشان-دهنده مقدار انرژی بیشتر و رنگ بنفش نشاندهنده مقدار انرژی کمتر است. در شکل ۵-الف ساختار لبه نوارهای هدایت و ظرفیت را در جهت رشد و همچنین سه ویژه مقدار اوليه انرژي براي الكترونها و اولين، دهمين و پانزدهمين ويژه مقادير انرژي براي حفرمها در دمای 300K و درصد استوکیومتری /In_{0.1}Ga_{0.9}As *GaAs* نشان دادمایم، همان گونه که از شکل پیداست، هیچ یک از ویژه مقادیر مجاز

انرژی در داخل نقطه کوانتومی قرار نگرفتهاند در شکل۵-ب مقدار درصد آلایش ایندیم را به 2.6 = x افزایش دادهایم مشاهده می شود که یکی از ترازها در داخل نقطه می افتد این تراز همان تراز حالت پایه GS است و در این حالت تراز برانگیخته (ES) خارج از نقطه است.



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

با افزایش درصد ایندیم و به موازات آن کاهش مقدار گالیم می بینیم که تعداد ترازهای بیشتری در داخل QD قرار می گیرند 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 می شود که کاهش مقدار گالیم در QD، موجب کاهش گاف نوار انرژی می شود. 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 300*K* .

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.





که اوری که به صورت احتلاف بهوار هدایت و طرفیت نعریف می سود با دیرهایی کوچک نشان داده شده است از شکل مشخص است که با افزایش X ارژی گف کاهش یافته است اما این که اختلاف انرژیی گاف و انربی فوتون تابشی 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 می گیرند خواهیم بود.

[1] Self-assembled quantum dots, Zhiming M. Wang, Springer, 2008

[2] http://www.nextnano.com/nextnanoplus

[3] Tielakis, A. etal. Te 3D nanometer device project next nano: Concepts, methods, results, J. Comput. Electronics, 5, 285 – 289 (2006).

[4] Bimer, S. et al. nextmano: General purpose 3-D simulations. IEEE T. Electron Dev. 54, 2137-2142 (2007).

[5] S. Pereira, M.R. Coneia, E. Pereira, C. Trager-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 instrained heteroepitaxial nanostructures multi-scale modeling, simulation and experiment, A. F. Bower, E. Chason, L. B. Fieundand 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] Bemhard Grotz, Moritz V. Hauf, Markus Danked, Boris raydenov, Schastien Pezzagna, Jan meijer, Fedor Jelezko, Jörg Wrachtup, Martin Stutzmann, Friedermann Reinhard & Jose A. Ganido, "Charge statemanipulation of qubits in diamond", Nature Communications, Vol. 10, 1038 (2012).