



تحلیل خواص نوری نقطه کوانتمی هرمی شکل InAs/GaAs به روش تنگ بست تعمیم داده شده Hückel

ستاره صداقت، مسعود برهمن، محمد حسین شیخی و عباس ظریفکار

دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر، دانشگاه شیراز، شیراز

چکیده - ساختار نقطه کوانتم به دلیل محدودیت سه بعدی، قابلیت گذار درون باندی در طول موج های مادون قرمز را دارد. به همین منظور در این مقاله به بررسی رفتار نوری نقطه کوانتم InAs هرمی شکل با اندازه های متفاوت پرداخته شده است. در این راستا، ابتدا رفتار الکترونیکی ساختار با روش EHT محاسبه شده و با استفاده از توابع موج به دست آمده و روش Kubo-Greenwood ضریب جذب محاسبه می شود. با مقایسه نتایج مشاهده می شود که با افزایش اندازه ساختار نقطه کوانتمی، انرژی و میزان جذب کاهش می یابد.

کلید واژه- تنگ بست تعمیم داده شده Hückel، ضریب جذب نوری، نقطه کوانتمی InAs/GaAs

Analysis of the Optical Properties of Self-Assembled Pyramidal InAs/GaAs Quantum Dot Using the Extended Hückel Tight-Binding Method

Setareh Sedaghat, Masoud Berahman, Mohammad Hossein Sheikhi, and Abbas Zarifkar

School of Electrical and Computer Engineering, Shiraz University, Shiraz

Abstract- Quantum-dot (QD) structures have the capability of the infrared intraband transitions because of their 3-dimensional confinement. In this paper, a self-assembled pyramidal InAs/GaAs QD is considered and the effects of the quantum dot geometry, such as the dot height and aspect ratio on the intraband transitions are theoretically studied by EHT formalism. The results show that QD size increase leads to considerable reduction of the beam absorption.

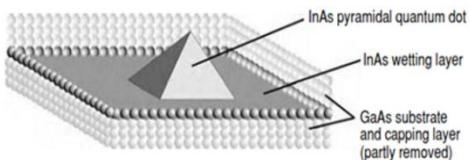
Keywords: Extended Hückel Tight-Binding, InAs/GaAs Quantum-Dot, Optical absorption coefficient.

۱- مقدمه

مبتنی بر آن، نتایج تحلیل و بحث های مربوط در بخش ۴ بیان می شود و جمعبندی نیز در بخش ۵ ارائه خواهد گردید.

۲- هندسه‌ی ساختار

در شکل ۱، ساختار یک نقطه کوانتومی هرمی نشان داده شده است. در رشد ساختار نقطه کوانتومی InAs با روش Stranski-Krastanov عدم اطباق در ثابت شبکه دو نوع ماده GaAs و InAs موجب ایجاد کشش بین دو لایه با جنس‌های مختلف می‌شود چند لایه ابتداي InAs یک لایه دو بعدی به نام InAs wetting ایجاد می‌کنند اگر لایه نشانی ادامه یابد نشاندن InAs در دو بعد خود به خود به صورت سه بعدی و حالت جزیره بر روی زیر لایه GaAs در می‌آید [۱]. جزایر به وجود آمده هرمی شکل در نظر گرفته شده و از آنجایی که زیر لایه GaAs در جهت (۱۰۰) رشد داده شده است برای اطباق پهتر بین InAs لایه‌ها نیز در همان جهت رشد داده می‌شود هم چنین، اتم‌های As در سایت اتمی ساختار بلوری زینک-بلیند GaAs قرار دارند و بعد از احاطه کننده محدوده محلسباتی را تعیین می‌کند.



شکل ۱: ساختار نقطه کوانتوم InAs هرمی شکل [۷].

۳- مبانی نظری تحلیل

در این بخش، روش‌های نظری بررسی رفتار الکترونیکی و نوری سیستم نقطه کوانتومی توضیح داده می‌شود. برای بررسی رفتار الکترونیکی سیستم از روش EHT استفاده می‌شود. در این روش، ساختار الکترونیکی نقطه کوانتومی توسط مجموعه پایه‌های اوربیتال‌های اتمی محلی بسط داده می‌شود (LCAO):

$$\phi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\hat{r}) \quad (1)$$

که Y_{lm} هارمونیک کروی بوده و R_{nl} جمع آثار اوربیتال‌های Slater می‌باشد.

$$R_{nl}(r) = \frac{r^{n-1-l}}{(2n)!} C_1 (2\eta_1)^{2n+1} e^{-\eta_1 r} \quad (2)$$

$$+ \frac{r^{n-1-l}}{(2n)!} C_2 (2\eta_2)^{2n+1} e^{-\eta_2 r}$$

ساختارهای نقطه کوانتومی InAs رشد یافته با روش خود انبلاشتگی (self-assembled) طی چندین دهه اخیر به دلیل داشتن مزایایی از جمله حساسیت ذاتی به نورهای تلبیشی عمودی، کاهش پراکندگی الکترون‌فونون، ترازهای برائگیخته با زمان پایداری بیشتر، جریان تاریک کمتر و دمای عملکرد بالاتر مورد بررسی قرار گرفته اند [۱]. این مزایا در نقطه کوانتومی موجبات آشکارسازی نور مادون قرمز را فراهم کرده است [۲]. رفتار جذبی این نقاط کوانتومی در طول موج عملکردی و میزان حساسیت آشکارسازهای نوری مادون قرمز سیلار مهمن است. پژوهش‌های نظری پیشین در زمینه بررسی خاصیت نوری نقطه کوانتومی را به دو دسته می‌توان تقسیم نمود: ۱- روش زنجیره وار ۲- روش مبتنی بر مدل‌سازی اتمی در روش‌های مدل‌سازی (continuum) اتمی هم چون ab initio و نظریه تابعی چگالی می‌توان دقت مورد نظر در محلسبه باند لرزی ساختار را به دست آورد ولی به دلیل حجم بالای محلسبت که بر مبنای اندازه واقعی سیستم (چند میلیون اتم) لجام می‌شود مفروض به صرفه نمی‌باشد [۳-۴]. در نتیجه برای این داشتن دقت مناسب و عدم نیاز به محلسبت سنگین در بررسی رفتار الکترونیکی و نوری احوات نلوبی از روش تجربی تنگ بست استفاده شده است در روش تجربی تنگ بست متعدد اوربیتال‌های سایت‌های مختلف (مجموعه پایه) را نسبت به هم متعلمد فرض می‌کنند از این روش برای ساختارهای به خصوصی می‌توان استفاده کرد از آنجا که تابع موج اتمی متعلمد نیست در نتیجه مجموعه پایه OTB نمی‌تواند به درستی حالت‌های ویژه همیلتونی اتمی را بیان کند بنابراین، برای تحلیل سیستم در مزین بین دو لایه با جنس‌های مختلف مناسب نیست [۵]. از این‌رو، با توجه به این که نقطه کوانتوم InAs با زیر لایه GaAs اختلاف ثابت شبکه ۷٪ می‌باشد بهتر است از روش شبکه تجربی تنگ بست با مجموعه پایه‌های غیر متعلمد استفاده شود این روش را nonorthogonal Tight-Binding می‌نامند زیلینسکی و همکارانش در سال ۲۰۱۰ بررسی رفتار الکترونیکی و نوری ساختار لرزی شکل نقطه کوانتومی رشد یافته به روش خود انبلاشتگی را با محاسبه ماتریس همیلتونی با روش تنگ بست متعلمد و پارامترهای Slater-Koster لجام داده اند [۶].

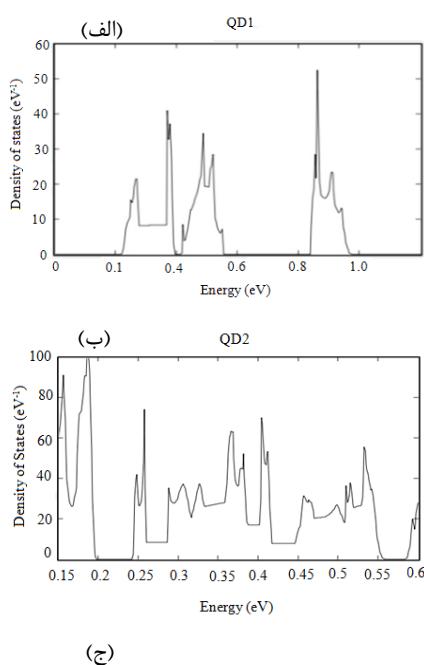
در این مقاله برای اولین بار، رفتار الکترونیکی نقطه کوانتوم InAs هرمی شکل رشد یافته بر روی زیر لایه GaAs را با روش شبکه تجربی غیر متعلمد Extended Hückel Tight-Binding (EHT) برای اوربیتال‌های sp^3 و با استفاده از پارامترهای برآش Greenwood (GW) برای نیمه هادی As و GaAs مورد بررسی قرار داده شده است. رفتار نوری این ساختار نیز با روش Kubo-Greenwood مطالعه شده است هم چنین تغییر لدازه نقطه کوانتومی در رفتار نوری ساختار مورد بررسی قرار گرفته است در ادامه در بخش ۲، به معرفی هندسه ساختار می‌پردازیم سپس در بخش ۳ مبانی نظری کار ارائه شده و

$$\text{Im}(\sqrt{\varepsilon_r}) \square \kappa = \frac{\sqrt{(\text{Re}(\varepsilon_r))^2 + (\text{Im}(\varepsilon_r))^2} - \text{Re}(\varepsilon_r)}{2} \quad (7)$$

$$\alpha_a = 2 \frac{\omega}{c} \kappa$$

۴- نتایج تحلیل و بحث

نقطه کوانتموم های مدل شده در این مقاله به صورت نقطه کوانتموم های جفت نشده و هرمی شکل به روش خود انباشتگی InAs/GaAs مورد بررسی قرار گرفته اند. سه نقطه کوانتموم مورد مطالعه دارای ابعاد و تعداد اتم های معینی که در ذیل به آن ها اشاره شده است، می باشند. لازم به ذکر است که قطبیدگی نور ورودی به صورت درون صفحه ای در نظر گرفته شده است. نقطه کوانتموم ۱، دارای سطح مقطعی با ابعاد $(A^\circ)^2 / 54 \times 427$ و ارتفاع $4/27 A^\circ$ می باشد که 54 اتم در بررسی رفتار چنین نقطه کوانتمومی مؤثرند. نقطه کوانتموم ۲، دارای سطح مقطعی با ابعاد $(A^\circ)^2 / 56 \times 10/5362$ و ارتفاع $4/29 A^\circ$ بوده که 190 اتم را شامل می شود و نقطه کوانتموم ۳، دارای سطح مقطعی با ابعاد $(A^\circ)^2 / 804 \times 12/58$ و ارتفاع $6/402 A^\circ$ می باشد و شامل 426 اتم می باشد. در ادامه چگالی حالت ها (DOS) این سه نقطه کوانتمومی و در نهایت ضریب جذب آن ها بررسی می شود. در شکل ۲، چگالی حالت های نقاط کوانتمی نشان داده شده است.



اوربیتال های اتمی محلی توسط پارامترهای C_1, η_2, η_1 و C_2 بیان می شوند که این پارامترهای برای اوربیتال های والانس هر اتم از سیستم یا هر نوع نیمه هادی تعريف شده است.

همیلتونی یک الکترون خواهد بود:

$$H_{ij} = \begin{cases} E_i + \delta V_H(R_i) \\ \frac{1}{4}(\beta_i + \beta_j)(E_i + E_j)S_{ij} + \frac{1}{2}(\delta V_H(R_i) + \delta V_H(R_j))S_{ij} \end{cases} \quad (4)$$

که در آن E_i انرژی اوربیتال i درایه ماتریس همپوشانی و β_i پارامتر برآذش Hückel بوده که معمولاً $1/75$ اختیار می شود [۷]. $\delta V_H(R_i)$ پتانسیل هارتالی است که اثر الکترون های دیگر در سیستم برتابع موج تک الکترون مورد نظر را نشان می دهد. این پتانسیل در مدل استاندارد Hückel لحاظ نشده و با حل معادله پواسون می توان آن را به دست آورد [۷]. با داشتن درایه های ماتریس همیلتونی و همپوشانی می توان با حل معادله مشخصه، مقادیر ویژه و حالت های ویژه انرژی را به دست آورد. برای بررسی طیف جذبی بایستی ضریب جذب را محاسبه کرد. به همین منظور، ابتدا با استفاده از روش Kubo-Greenwood تانسور پذیرفتاری را محاسبه کرده و با دانستن معادله (۶) که نشان دهنده ارتباط گذردهی نسبی با تانسور پذیرفتاری است، گذردهی نسبی به دست می آید.

$$\chi_{ij}(\omega) = -\frac{e^2 \hbar^4}{m^2 \epsilon_0 V \omega^2} \sum_{nm} \frac{f(E_m) - f(E_n)}{E_{nm} - \hbar \omega - i \hbar \Gamma} \pi_{nm}^j \pi_{mn}^j \quad (5)$$

π_{nm}^j مؤلفه i ام ماتریس اندازه حرکت (منتم) که همان ماتریس مشتق همیلتونی است بین دو حالت m و n می باشد. V حجم، Γ پارامتر پهنه شدگی و f تابع فرمی است.

$$\epsilon_r(\omega) = (1 + \chi(\omega)) \quad (6)$$

$\sqrt{\epsilon_r}$ مقداری مختلط بوده که قسمت موہومی آن؛ یعنی، ضریب extinction با ضریب جذب با رابطه زیر در ارتباط است:

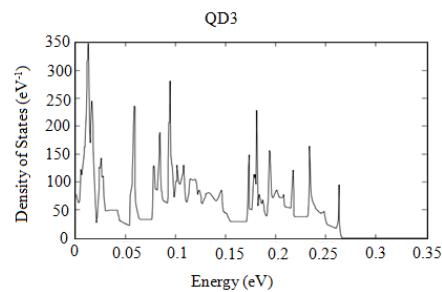
نتیجه در مجموع با افزایش اندازه نقطه کوانتومی ضریب جذب کاهش می
یابد.

۵- نتیجه گیری

در این مقاله ابتدا رفتار الکترونیکی نقطه کولتوم InAs هرمی شکل با روش EHT به دست آمد و با فرمول kubo-Greenwood و با داشتن حالت های ایزوتropی به دست آمده از EHT ضریب جذب در قطبیدگی درون صفحه ای محاسبه گردید. این روند برای سه نقطه کولتوم با اندازه ها و نسبت بعد مختلف انجام شد در این محاسبات مشاهده شد که با افزایش بعد نقطه کوانتوم ایزوتropی گذار به دلیل کاهش فاصله ترازهای ایزوتropی درون بندی کاهش یافته است هم چنین کاهش ضریب جذب نیز به دلیل کاهش DOS در نقطه کوانتوم با بعد بزرگتر مشاهده می شود.

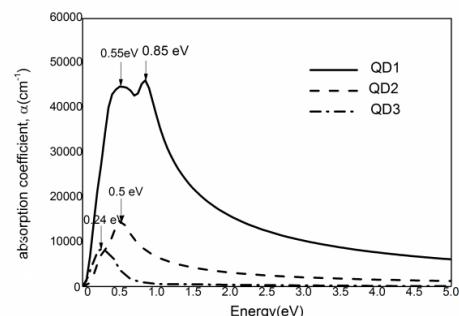
مراجع

- [1] Chakrabarti, S., Stiff-Roberts, A. D., Su, X. U., Bhattacharya, P., Ariyawansa, G., and Perera, A. G. U., *High-performance mid-infrared quantum dot infrared photodetectors*, J. Phys. D: Appl. Phys., Vol. 38,: 2135- 2141 , 2005.
- [2] Chen, Z., Baklenov, O., Kim, E. T., Mukhametzhanov, I., Tie, J., Madhukar A., Ye, Z., and Campbell, J. C., *Normal incidence InAs/AlxGa1-xAs quantum dot infrared photodetectors with undoped active region*, J. Appl. Phys.,Vol. 89,: 4558- 4563, 2001.
- [3] Zielinski, M., *Including strain in atomistic tight-binding Hamiltonians: An application to self-assembled InAs/GaAs and InAs/InP quantum dots*, Phys. Rev. B, Vol. 86, 115424: 1- 9, 2012.
- [4] Zieliński, M., Korkusiński, M., and Hawrylak, P., *Atomistic tight-binding theory of multiexciton complexes in a self-assembled InAs quantum dot*, Phys. Rev. B, Vol. 81, 085301: 1-12, 2010.
- [5] Kienle, D., Cerda, J. I., and Ghosh, A. W., *Extended Hückel theory for band structure, chemistry, and transport. I. Carbon nanotubes*, J. Appl. Phys., Vol. 100, 043714: 1- 9, 2006.
- [6] Novotny, L., and Hecht, B., *Principles of Nano-Optics*, p.310, Cambridge University Press, 2006.
- [7] Stokbro, K., Petersen, D. E., Smidstrup, S., Blom, A., and Ipsen, M., *Semi-Empirical Model for Nano-Scale Device Simulations*, Phys. Rev. B, Vol. 82, 075420, 2010.
- [8] Baskoutas, S., Terzis, A. F., *Size-dependent bandgap of colloidal quantum dots*, J. Appl. Phys., Vol. 99, 013708 : 1-3, 2006.
- [9] Karabulut, I., Baskoutas, S., *Linear and nonlinear optical absorption coefficients and refractive index changes in spherical quantum dots: Effects of impurities, electric field, size, and optical intensity*, J. Appl. Phys., Vol. 103, 073512: 1- 5, 2008.
- [10] Prodanovic', N., Vukmirovic', N., Indjin, D., Ikonic', Z., and Harrison, P., *Electronic states and intraband terahertz optical transitions in InGaAs quantum rods*, J. Appl. Phys., Vol. 111, 073110: 1- 6, 2012.



شکل ۲: چگالی حالت نقطه کوانتومی: (الف) نقطه کوانتومی ۱. ب) نقطه کوانتومی ۲. ج) نقطه کوانتومی ۳.

در شکل ۳ ضریب جذب محاسبه شده برای سه اندازه مختلف نقطه کوانتوم آورده شده است. در هر حالت پارامتر پهن شدگی (Γ) ۲۰ meV است. با توجه به شکل ۳، ضریب جذب این نقطه کوانتوم های ۱۰۲ و ۳ به ترتیب $(cm^{-1})^{1/3}$ و $(cm^{-1})^{1/2}$ می باشد.



شکل ۳: ضریب جذب نقطه کوانتوم.

نقطه کوانتومی ۳ سطح مقطع و ارتفاع بیشتری نسبت به دو ساختار دیگر دارد در مورد ارتباط سطح مقطع و ضریب جذب نقطه کوانتومی با توجه به شکل ۳ می توان گفت که با افزایش سطح مقطع ضریب جذب کاهش می یابد این کاهش از فشردگی کوانتومی ضعیف تر حمل ها در نقطه کوانتوم با سطح مقطع بیشتر ناشی می شود از آنجایی که نسبت بعد نیز با افزایش اندازه نقطه کولتوم زیاد شده است این گونه به نظر می رسد که نقطه کولتوم صاف تر شده و رفتاری نزدیکتر به چه کوانتومی دارد تحدید کوانتومی ضعیف منجر به کاهش فاصله الکترون-حفره در سه بعد شده و در نتیجه گلف ایزوتropی مؤثر اکسایتن کاهش یافته و متعاقباً جبله جانی به ایزوتropی پایین تر در طیف جذب مشاهده می شود.^{۸-۹} از طرفی، در نقطه کوانتوم هایی با ارتفاع بیشتر فاصله حالت های گذار درون بندی کاهش یافته در نتیجه ایزوتropی گذار کاهش می یابد.^{۱۰} یکی از دلایل کاهش ضریب جذب در نقطه کوانتوم هایی با سطح مقطع و ارتفاع بیشتر می تواند کاهش چگالی حالت مربوط به ایزوتropی گذار باشد؛ البته ممکن است چگالی حالت افزایش یابد و لی احتمال توزیع حمل های نیز خود یک فاکتور مهم به حساب می آید در