

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه تبریز

دانشکده فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک

گرایش حالت جامد

نقش میدان های پلاریزاسیون در
فوتولومینسانس حاصل از چاه های کوانتومی
نیم رساناهای نیتروژندار

استاد راهنما:

دکتر حمید هراتی زاده

نگارش:

مرتضی اسمعیلی

دی ماه ۱۳۸۴

نقدیست کم عیار

به پاس زحماتشان

تقدیم به:

پدر فداکارم و مادر مهربانم

بخاطر حمایت های بیکران شان در تمام مراحل زندگی ام

تقدیر و تشکر

حمد و سپاس پروردگار یکتا را که لطف و کرم بی کرانش اینجانب را نیز در بر گرفت تا به وسع توان و اندیشه خود گامی کوچک در گستره پهناور علم و معرفت بردارم و میسر گشت تا از خرمن دانش و تجربه بزرگان و نیک اندیشان خوشه چینی کرده و میوه ای از باغ علم در دامن پرورش دهم.

اکنون که با یاری خداوند متعال، این دوره پر خاطره از دوران تحصیلم را به پایان رسانده ام؛ هرچند واژه ها را یارای آن نیست که لطف، محبت و بزرگواری کسانی را که در تمام دوران زندگیم جرعه نوش دریای بیکران مهر و محبتشان بوده ام را به تصویر بکشم، اما به رسم ادب و احترام بوسه بر دستانشان زده و بر خود واجب می دانم زحمات تمامی اعضای خانواده ام، مخصوصاً پدر و مادر مهربانم، که با ایجاد جوی صمیمی راه گشای مشکلاتم در تمام مراحل زندگی بوده اند و کلیه معلمان، اساتید و دوستان دوران تحصیلم را ارج نهاده و مراتب تشکر قلبی و باطنی خویش را از الطاف و مهربانیهای آنها ابراز دارم. در ابتدا لازم می دانم که از زحمات فراوان و کارگشای استاد فرزانه و بزرگواری آقای **دکتر حمید هراتی زاده** که با راهنمایی ها و نظرات ارزنده و گهربارشان و صبر و حوصله فراوان، نقش مهمی در به ثمر رسیدن این تحقیق داشته اند و روحیه تحقیق و پژوهش را در بین دانشجویان خود زنده کردند، صمیمانه تقدیر و تشکر نمایم؛ بی تردید انجام این پایان نامه بدون همکاری ایشان هرگز ممکن نبود. همچنین از دوستان بزرگواری آقای محمود صابونی و خانم طبسی که در یک گروه کوچک ولیکن صمیمی وقت زیادی را صرف بحث های علمی و تشکیل جلسات متعدد کردند و مساعدتهایی که در انجام مراحل این پروژه داشته اند نیز سپاسگزاری می نمایم.

همچنین بر خود لازم می دانم از جناب پروفسور هیروشی آمانو و سایر همکارانشان در دانشگاه میجو ژاپن که نمونه های مورد آزمایش را جهت اندازه گیری ها ساخته اند و جناب پروفسور بو مونمار و پروفسور پر اولاف هولتز در انستیتوی تکنولوژی و سنجش دانشگاه لینشوپینگ سوئد بخاطر در اختیار گذاشتن داده های تجربی بررسی شده در این تز و استفاده از نتایج آزمایشهایی که با هدایت آنها در دانشگاه لینشوپینگ سوئد انجام شده و در اختیار گذاشتن منابع مورد احتیاج جهت تکمیل پایان نامه کمال سپاسگزاری و تشکر را داشته باشم. از هیت محترم داوران به خاطر قبولی داوری و نقد و بررسی پایان نامه کمال تشکر را دارم. و در نهایت از تمام دوستان خود در دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود خصوصاً آقایان روح الله امیری و محمدی تبار و صادقی همچنین سرکار خانم مریم غلامی تشکر می کنم.



چکیده

نیمرساناهای نیتروژندار خانواده تری نیترایدها به علت گستردگی گاف انرژی آنها که از ناحیه IR تا UV را شامل می شود کاندیداهای خوبی برای ساخت قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی هستند. یکی از مشکلاتی که در نانو ساختارهای نیتروژن دار وجود دارد، عدم انطباق در ثابت شبکه لایه های رشد داده شده بر روی یکدیگر می باشد این موضوع باعث به وجود آمدن کرنش در ساختار می شود که در اثر آن بارهای قطبشی در سطح مشترک لایه ها بوجود می آید و این بارهای قطبشی به نوبه خود تولید میدان های قطبشی در نمونه خواهند کرد. این دسته از مواد به طور طبیعی در ساختار ورتسایتس متبلور می شوند و دارای یک شبکه براوه شش گوشه با حضور چهار اتم بر هر سلول واحد هستند. اندازه گیری فوتولومینسانس نانو ساختارهای GaN/AlGaIn و InGaIn/GaN حضور میدانهای الکتریکی داخلی ناشی از بارهای قطبشی القایی را به اثبات می رساند. این میدان های قطبشی باعث می شوند که چاه های کوانتومی از حالت مسطح خارج شده و تبدیل به چاه های مثلثی شوند و در نتیجه بر روی خواص اپتیکی نمونه مورد بررسی به شدت تاثیر می گذارند و مکان طیفی پیک فوتولومینسانس و همچنین مکانیسم باز ترکیب حامل ها و میزان هم پوشانی توابع موج الکترون و حفره را تحت تاثیر قرار می دهند. هدف اصلی این پروژه نیز بررسی اثر این میدان ها روی تابش گسیلی از این نانو ساختارها می باشد.

نمونه های مورد مطالعه چاه های کوانتومی چندگانه GaN/AlGaIn می باشند که از تکرار متناوب پنج لایه از جنس GaN و AlGaIn با ضخامت های تقریبی به ترتیب 3nm و 7nm با آلایش سیلیکونی و درصدهای مولی Al متفاوت بر روی زیرلایه Sapphire و در راستای [0001] ساخته شده اند. نمونه ها دارای آلایش سیلیکونی متفاوت با هم هستند و همگی حاوی 7٪ Al در سد ها می باشند. برای رشد نمونه ها از روش نیمه صنعتی رسوب گذاری بخار شیمیایی ترکیبات آلی فلزی^۱ استفاده شده است. برای انجام اندازه گیری های اپتیکی از تکنیک های اندازه گیری فوتولومینسانس معمولی^۲ و فوتولومینسانس وابسته به زمان^۳ استفاده شده است.

نتایج اندازه گیری های ما نشان می دهند که در طیف PL تمامی نمونه ها با آلایش های سیلیکونی متفاوت پیک گسیل تابشی حاصل از چاه های کوانتومی نسبت به پیک گسیل تابشی حاصل از GaN لایه بافر (3/48eV) شیفته به سمت انرژی های بیشتر نشان می دهد. وابستگی دمایی طیف PL همه نمونه ها بررسی شد و از روی آن مقدار انرژی جایگزینی اکسیژن ها به دست آمد و مشاهده کردیم که با افزایش آلایش سیلیکونی میزان انرژی جایگزینی کاهش پیدا می کند. همچنین وابستگی دمایی طول عمر تابشی و غیرتابشی در محدوده دمایی ۳۰۰-۲۰۰ کلوین برای نمونه بدون آلایش و با آلایش خیلی زیاد از گروه اول نشان می دهند که در محدوده دماهای پایین مکانیسم باز ترکیب تابشی غالب بوده ولی در محدوده دماهای بالا مکانیسم باز ترکیب غیرتابشی غالب می گردد. همچنین علی رغم وجود نقایص ساختاری بیشتر در نمونه آلایش یافته، بعلاوه تشکیل یک ناحیه گاز الکترون دوبعدی، باز ترکیب های تابشی تا دماهای بالاتری بعنوان عامل غالب نسبت به نمونه بدون آلایش عمل می نمایند که این موضوع به افزایش قابل ملاحظه بازده نوری در اثر آلایش سیلیکونی در این ساختارها می انجامد. مطالعه زمانی پیک فوتولومینسانس شیفته به انرژی های کمتر را در نمونه های با آلایش کم نشان داد در حالیکه در نمونه های آلایش یافته هیچگونه تغییری در محل پیک PL در طی زمان مشاهده نمی شود و این نشان دهنده غلبه آلایش های سیلیکونی بر حامل های نوری برای استتار میدان قطبشی داخلی در این نمونه ها است.

¹ Metal Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD)

² Photoluminescence(PL)

³ Time Resolved Photoluminescence(TRPL)

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
تشکر و قدردانی	ا
چکیده	ب
فهرست مطالب	ت
فهرست شکل ها	خ
فهرست جداول	س
مقدمه	۱
بخش اول	

فصل اول - مفاهیم اساسی در بلورهای نیمه رسانا و خصوصیات آنها

مواد نیمه رسانا و سیر تحول آنها	۶
فهرست منابع	۱۱

فصل دوم - ساختار بلوری و نواری مواد نیمه هادی گروه III - نیترایدها

۱-۲- مقدمه	۱۳
۲-۲- ساختار بلوری نیمه رساناهای نیتروژندار III-V و ثابت شبکه آنها	۱۳
۱-۲-۲- گالیم نیتراید (GaN)	۱۷
۲-۲-۲- آلومینیم نیتراید (AlN)	۱۹
۳-۲-۲- ایندیم نیتراید (InN)	۱۹
۳-۲- آلیاژهای AlGaN	۲۰
۴-۲- ساختار نواری تری نیترایدها	۲۲
۵-۲- رشد بلوهای گروه III-N	۲۴
۱-۵-۲- زیر لایه های متداول در رشد بلورهای گروه III-V	۲۵
۲-۵-۲- روش رشد روشینی پرتو مولکولی (MBE)	۲۶
۲-۵-۲- الف- موانع ومشکلات در رشد MBE تری نیترایدها	۲۷
۳-۵-۲- روش رشد رسوب گذاری بخار شیمیایی (MOCVD)	۲۷
فهرست منابع	۳۰

فصل سوم - فرآیندها باز ترکیب در نیمه رساناهای نیتروژندار، تکنیک های

تجربی و روش آزمایشگاهی

۳۳	 ۱-۳ مقدمه
۳۳	 ۲-۳ اسپکتروسکوپی فوتولومینسانس (PL)
۳۴	 ۱-۲-۳ معرفی تکنیک فوتولومینسانس
۳۸	 ۱-۲-۳ الف- آشکارساز CCD
۳۸	 ۱-۲-۳ ب- کرایستات
۳۹	 ۳-۳ اصول روش فوتولومینسانس وابسته به زمان (TRPL)
۴۰	 ۱-۳-۳ سیستم Streak camera
۴۰	 ۴-۳ بازترکیب های نوری در تری نیتراید (III-N)
۴۲	 ۱-۴-۳ بازترکیب نوار به نوار
۴۳	 ۲-۴-۳ بازترکیب اکسیتون آزاد
۴۵	 ۳-۴-۳ اکسیتون های جایگزیده
۴۷	 ۴-۴-۳ بازترکیب حامل آزاد - حامل مقید
۴۸	 ۵-۴-۳ بازترکیب های غیرتابشی
۴۸	 ۵-۳ اکسیتون ها در چاه های کوانتومی
۵۰	 فهرست منابع

فصل چهارم - نانو ساختارهای کوانتومی گروه تری نیتراید و ویژگی های آنها

۵۲	 ۱-۴ مقدمه
۵۲	 ۲-۴ ساختارهای نامتجانس نیمه هادی
۵۴	 ۳-۴ ساختارهای چاه کوانتومی
۵۸	 ۴-۴ انواع چاه های پتانسیل کوانتومی
۶۰	 ۵-۴ کرنش در نیمرساناهای نیتروژندار
۶۳	 ۱-۵-۴ تئوری پتانسیل تغییر شکل
۶۵	 ۶-۴ محاسبه انفصال نواری ^۴ در نانو ساختارهای کوانتومی نیتروژندار
۶۸	 ۷-۴ تکنیک اضافه کردن آلایش در لایه سد چاه های کوانتومی
۷۱	 فهرست منابع

^۴ Band offset

فصل پنجم - معرفی میدان های قطبشی داخلی در نانو ساختارهای کوانتومی نیتروژندار و محاسبه میدانها در نمونه های مورد مطالعه

۷۴	 ۱-۵ مقدمه
۷۴	 ۲-۵ قطبش پیزوالکتریک
۷۶	 ۳-۵ قطبش خود به خودی
۸۰	 ۴-۵ ساختار نمونه های مورد مطالعه در این پروژه
۸۲	 ۵-۵ اثر کوانتومی محدود شده استارک ^۵
۸۳	 ۶-۵ محاسبه اندازه میدان قطبشی پیزوالکتریک و خود به خودی در چاه های کوانتومی چندگانه $GaN/Al_{0.7}Ga_{0.3}N$
۸۹	 ۷-۵ میدان تهی و محاسبه مقدار آن در چاه های کوانتومی $GaN/Al_{0.7}Ga_{0.3}N$
	 ۸-۵ اثر حامل های آزاد(حامل های آلایشی و تزریقی ^۶ و نوری) در فرآیند های باز ترکیب و استتار میدان های قطبشی داخلی در تری نیترایدها
۹۱	
۹۹	 فهرست منابع

فصل ششم - تحلیل نتایج بدست آمده و بحث در مورد نتایج فیزیکی

۱۰۲	 ۱-۶ مقدمه
	 ۲-۶ تأیید تجربی بر استتار میدانهای قطبشی داخلی MQW های $GaN/Al_{0.7}Ga_{0.3}N$
۱۰۳	 توسط آلایش سیلیکونی با استفاده از طیف فوتولومینسانس معمولی
	 ۳-۶ تأیید تجربی بر افزایش راندمان نوری ناشی از آلایش سیلیکونی در MQW های $GaN/AlGaIn$
۱۰۸	
	 ۴-۶ تعیین تجربی نوع مکانیسم باز ترکیب نوری در آلایش های سیلیکونی مختلف در چاه های کوانتومی $GaN/AlGaIn$
۱۱۰	
	 ۵-۶ بررسی تجربی اثر آلایش سیلیکونی بر روی مکانیسم باز ترکیب نوری و غیرنوری در چاههای کوانتومی چندگانه $GaN/AlGaIn$
۱۱۴	
	 ۶-۶ تعیین تجربی انرژی جایگزیدگی در چاه های کوانتومی GaN به کمک تغییرات دمایی طیف فوتولومینسانس معمولی
۱۱۷	
	 ۷-۶ رقابت حامل های نوری و دائمی در استتار میدان های قطبشی در چاه های کوانتومی $GaN/AlGaIn$
۱۲۰	
	 ۸-۶ مطالعه وابستگی نوری لومینسانس نمونه ها در اثر تغییر شدت نور تحریکی
۱۲۴	
۱۲۶	 فهرست منابع

^۵ Quantum Confined Stark Effect(QCSE)

^۶ Injected carrier

بخش دوم

مقاله های ارائه شده به ژورنالهای بین المللی، کنفرانس های بین المللی و داخلی

مقاله اول - استتار میدانهای قطبشی داخلی نانوساختارهای گالیم نیتراید

..... Dynamical Study of the Radiative Recombination Processes in GaN/AlGaIn QWs - مقاله دوم

مقاله سوم - رقابت بازترکیب های نوری و غیرنوری در چاه های کوانتومی چندگانه

..... GaN/AlGaIn

مقاله چهارم - رقابت حامل های نوری و آلایش سیلیکونی در استتار میدان های قطبشی

..... GaN در چاه کوانتومی

Paper 5- Effect of the extrinsic and temporal carriers on radiative recombination of III-nitride nanostructures

Paper 6- The effect of Al composition and Si doping on the optical properties of GaN/AlGaIn multi Quantum Well nanostructure.....

فهرست شکل ها

صفحه	عنوان
۸	شکل ۱-۱ - اثر تغییر پهنای چاه بر روی ترازهای انرژی در یک چاه کوانتومی تنها
۱۰	شکل ۱-۲ - بستگی گاف انرژی گالیم آرسناید به دما
۱۴	شکل ۱-۲ - ترتیب قرارگیری اتمها در یک ساختار الف) hcp و ب) ورتسایتس (Wz). دو ثابت شبکه a و c نیز نشان داده شده اند. ج) نمایش منطقه اول بریلوئن ساختار ورتسایتس (نقاط با تقارن بالای A و M و Γ نیز نشان داده شده اند).
۱۵	شکل ۲-۲ - ترتیب قرارگیری اتمها در الف) سلول واحد شبکه fcc و ب) سلول واحد ساختار زینک (ZB). ثابت شبکه a نیز نشان داده شده است. ج) نمایش منطقه اول بریلوئن ساختار زینک بلند (نقاط با تقارن بالای X و L و Γ نیز نشان داده شده اند).
۱۶	شکل ۲-۳ - نحوه چینش اتمها در ساختارهای Wz و زینک بلند. به چرخش اتمها در ساختار زینک بلند توجه کنید.
۱۷	شکل ۲-۴ - انرژی گاف نواری بر حسب ثابت شبکه (انرژی گاف نواری InN اخیراً مقدار ۰/۷ الکترون ولت گزارش شده است که کاملاً معتبر می باشد).
۱۷	شکل ۲-۵ - بستگی به میزان x، انرژی گاف نواری AlGaIn که توسط گروه های مختلف اندازه گیری شده اند (مقدار ۰/۲۵ b= که در این تر از آن استفاده شده است، توسط آمانو گزارش شده است).
۲۳	شکل ۲-۶ - ساختار نواری محاسبه شده در نزدیکی نقطه Γ برای بلور GaAs که دارای ساختار زینک بلند می باشد
۲۴	شکل ۲-۷ - ساختار نواری محاسبه شده در نزدیکی نقطه Γ برای بلور GaN که دارای ساختار ورتسایتس می باشد
۲۸	شکل ۲-۸ - نمایشی از سطح مقطع عرضی یک سیستم رشد بلور MBE
۳۶	شکل ۳-۱ - طرح شماتیکی از آزمایش فوتولومینسانس معمولی
۳۹	شکل ۳-۲ - شکل شماتیک یک کریستات و سیستم خنک کننده که در آزمایشهای PL استفاده شده است همراه با نمایش یک نمونه واقعی از آن که با هلیوم مایع کار می کند
۴۲	شکل ۳-۳ - طرح شماتیک دو گذار تابشی ذاتی الف) بازترکیب نوار به نوار و ب) بازترکیب اکسیژن آزاد در یک چاه کوانتومی GaN/AlGaIn
۴۲	شکل ۳-۴ - طرح شماتیک چند نمونه از فرآیندهای بازترکیب تابشی غیرذاتی در چاه های کوانتومی GaN/AlGaIn الف) اکسیژن مقید شده (در اینجا اکسیژن مقید شده به پذیرنده ها) ب) و ج) بازترکیب حامل آزاد- حامل مقید د) بازترکیب جفت دهنده و پذیرنده

- شکل ۳-۵- الف) گذارهایی که بین دو نوار ظرفیت و هدایت و ب) گذارهایی که بین زیرترازهای یک نوار(هدایت یا ظرفیت) در یک QW اتفاق می افتد ۴۳
- شکل ۳-۶- شکل شماتیک یک اکسیتون فرنکل و یک اکسیتون موت - واینر ۴۴
- شکل ۳-۷- طرحواره ای از جایگزیدگی اکسیتون ها در افت وخیزهای پتانسیل ناشی از ناهموای سطح ۴۶
- شکل ۳-۸- نمودار وابستگی دمایی طیف PL حاصل از چاه کوانتومی چندگانه GaN/AlGaIn بدون آلایش در دمای ۲K ۴۷
- شکل ۴-۱- طرح شماتیک ساختارهای نیمه هادی الف) نامتجانس ب) چاه کوانتومی تنها ج) چاه کوانتومی چندگانه GaN/AlGaIn همراه با شکل شماتیکی از ساختار نواری آنها ۵۳
- شکل ۴-۲- شکل شماتیک ساختار یک نیمه رسانای کوانتوم دات، سیم کوانتومی (QWi)، چاه کوانتومی (QW) و نیمه رسانای پله ای (Bulk) (به ترتیب از سمت راست به چپ) ۵۴
- شکل ۴-۳- نمودار چگالی حالات برای سیستم های دو و سه بعدی ۵۷
- شکل ۴-۴- نمایش طرحواره الف) یک چاه کوانتومی نیمه سانای نوع اول (I)، ب و ج) دو نمونه از ساختار نوع دوم (II) ۵۹
- شکل ۴-۵- طرح شماتیکی از تغییر شکل الاستیکی به علت عدم انطباق شبکه دریک کریستال دوبعدی ۶۱
- شکل ۴-۶- طرحواره شماتیک شیفت و شکافتگی ایجاد شده درگاف نواری برای کرنش کششی و تراکمی ۶۴
- شکل ۴-۷- طرحواره دو نوع مختلف از انفصال نواری در تری نیترایدها ۶۵
- شکل ۴-۸- شکل شماتیک الف) یک ساختار نامتجانس که در آن لایه B بر روی لایه A به ضخامت d در حالتی که هیچ میدان خارجی وجود ندارد، رشد یافته است. ب) اثر میدان ای قطبشی بر روی انفصال نواری نوار ظرفیت (به وضوح انفصال نواری به مقدار میدان و ضخامت لایه رشد داده شده بستگی دارد). ۶۷
- شکل ۴-۹- اتصال نواری نوار رسانش بر حسب ثابت شبکه در ساختار های ZB ۶۸
- شکل ۴-۱۰- شکل یک ساختار کوانتومی آلایش یافته و نحوه تشکیل گاز الکترونی دوبعدی و انتقال الکترون ها به داخل چاه ها (اتم های آلایشی در سد قرار داده شده اند و چاه کوانتومی بدون آلایش می باشد) ۷۰
- شکل ۵-۱- مقادیر قطبش خود به خودی محاسبه شده با استفاده از قانون وگارد برای آلیاژهای $Al_xIn_yGa_{(1-x-y)}N$ ۷۸
- شکل ۵-۲- الف) شکل شماتیک ساختار بلوری، بارهای قطبسی و جهت میدان های قطبشی در ساختار ناهمگون AlN/GaN که به صورت Ga-face و N-face رشد یافته است. ب) نمایش قطبش خود به خودی و پیزوالکتریک و محل تشکیل گاز الکترونی دو بعدی در

- ۷۹ ساختار ناهمگون GaN/AlGaIn/GaN که به صورت Ga-face و N-face رشد یافته است
- ۸۱ شکل ۵-۳- شکل شماتیکی از چاه های کوانتومی چندگانه GaN/AlGaIn با پهنای چاه ۳nm
- ۸۱ شکل ۵-۴- طیف XRD نمونه های مورد بررسی در پایان نامه
- شکل ۵-۵-الف) طرح شماتیک یک چاه کوانتومی اغتشاش نیافته و اغتشاش یافته در اثر وجود میدان های قطبشی داخلی. ب) مقدار کاهش در انرژی حاصل از بازترکیب حامل ها، ناشی از اثر کوانتومی استارک به وضوح نشان داده شده است
- ۸۲ شکل ۵-۶- کاهش اثر محدود شده کوانتومی در اثر افزایش حامل های نوری در یک چاه کوانتومی (به کاهش خمیدگی کف چاه پتانسل که ناشی از استتار موثر میدان های داخلی چاه می باشد توجه کنید)
- ۸۳ شکل ۵-۷- جابجایی قله های فتولومینسانس در چاههای ۳nm هنگامیکه باریکه نور لیزر فرودی در عرض نمونه ها جابجا می شود
- ۸۴ شکل ۵-۸- تغییرات ۱۰۰ میکرونی از جابجایی قله های فتولومینسانس در سرتاسر نمونه ۳۰Å
- ۸۴ شکل ۵-۹- انرژی محاسبه شده حاصل از بازترکیب بین الکترون و حفره سنگین در تراز پایه، $E_{e,hh}$ ، در تقریب چاه کوانتومی مثلی که به اندازه انرژی بستگی اکسیتون، ۲۸meV، در حالت نبود میدان الکتریکی کاهش یافته است؛ همراه با انرژی پیک QW در چند نمونه با آرایش های پایین
- ۸۷ شکل ۵-۱۰- میدان قطبشی الکترواستاتیکی کل در ناحیه فعال چاه کوانتومی چندگانه $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{(1-x-y)}\text{N}/\text{GaN}$ برحسب درصد مولی Al و In (میدان ها در روی شکل بر حسب MV/cm) بیان شده اند و جهت مثبت میدان راستای [۰۰۱] فرض شده و نمونه Ga-face می باشد
- ۸۷ شکل ۵-۱۱- مولفه پیزوالکتریک میدان قطبشی الکترواستاتیکی کل در ناحیه فعال چاه کوانتومی چندگانه بحث شده در شکل ۵-۸
- ۸۸ شکل ۵-۱۲- میدان قطبشی کل و مولفه پیزوالکتریک آن در چاه کوانتومی $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ که با استفاده از قانون وگارد محاسبه شده است
- ۸۹ شکل ۵-۱۳-الف) شکل سطح مقطع عرضی پتانسیل برای نمونه با آرایش سیلیکونی پایین ($N_d \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) ب) شکل متناظر با قسمت الف برای نمونه با آرایش سیلیکونی متوسط ($N_d \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) که در آن به وضوح اثر میدان تهی در غیر فعال کردن چاه های بیرونی تر نشان داده شده است)
- ۹۰ شکل ۵-۱۴-الف) انرژی گسیلی تراز پایه و ب) قدرت نوسانگر، در چاه های کوانتومی چندگانه $\text{GaN}/\text{Al}_{1/3}\text{Ga}_{2/3}\text{N}$ برحسب چگالی های آلاشی n, p در چگالی های متفاوت از حامل های آزاد تزریقی
- ۹۳

- شکل ۵-۵ الف) انرژی گسیلی تراز پایه و ب) قدرت نوسانگر، در چاه های کوانتومی چندگانه $\text{GaN}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ برحسب چگالی های آلایشی n, p در چگالی های متفاوت از حامل های آزاد تزریقی ۹۴
- شکل ۵-۱۶- تغییرات در شیفیت انرژی گذار C_1-V_1 برحسب درصدهای مولی مختلف Al در $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ ، MQW ؛ وقتی که چگالی حامل های آلایشی از $(\text{cm}^{-2}) 10^{17}$ تا $(\text{cm}^{-2}) 3 \times 10^{19}$ تغییر می کند ۹۵
- شکل ۵-۱۷- شبیه سازی سطح مقطع عرضی نوار رسانش در یک چاه کوانتومی تنها $\text{GaN}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ با پهنای چاه ۵۰ Å که در ناحیه سد آلایش یافته است (با روش بستگی قوی محاسبه شده است) ۹۶
- شکل ۵-۱۸- محاسبات خودسازگار و شبیه سازی لبه نوار رسانش برای یک چاه کوانتومی GaN/AlGaIn به ضخامت ۵۰ آنگستروم در چگالی حامل های آزاد نوری مختلف ۹۷
- شکل ۵-۱۹- نمودار مقدار شیفیت به سمت قرمز در انرژی تراز پایه و احتمال این گذار تابشی در ضخامت های مختلف از چاه کوانتومی GaN/AlGaIn ۹۸
- شکل ۶-۱- طیف PL حاصل از تمام نمونه ها در دمای ۲K (به شیفیت به سمت آبی پیک QW نسبت به GaN که ای توجه کنید) ۱۰۵
- شکل ۶-۲- طیف PL حاصل از سه نمونه از چاه های GaN/AlGaIn با پهنای چاه متفاوت در دمای ۲K (به محل قرارگیری پیک حاصل از چاه های کوانتومی و GaN که ای در ضخامت های متفاوت دقت کنید) ۱۰۶
- شکل ۶-۳- طیف فوتولومینسانس نرمالیزه شده تمام نمونه ها در دمای ۲K ۱۰۶
- شکل ۶-۴- نمودار تغییرات انرژی پیک فوتولومینسانس حاصل از چاه های کوانتومی GaN/AlGaIn با افزایش آلایش سیلیکونی در سدهای AlGaIn ۱۰۷
- شکل ۶-۵- تغییرات پهنای پیک فوتولومینسانس حاصل از QW ها (FWHM) بر حسب چگالی آلایش ۱۰۹
- شکل ۶-۶- طیف فوتولومینسانس نمونه های با چگال آلایش متفاوت در دمای ۲K (به افزایش مساحت زیرمنحنی پیک PL حاصل از QW ها با افزایش سیلیکونی توجه کنید) ۱۰۹
- شکل ۶-۷ الف) نمودار تغییرات زمان واهلش پیک PL چاه های کوانتومی در آلایش های مختلف ب) نمودار تغییرات زمان واهلش در چند انرژی مهم برای نمونه بدون آلایش ۱۱۰
- شکل ۶-۸- تصویر TEM نمونه ۱۱۱
- شکل ۶-۹- تغییرات انرژی پیک فوتولومینسانس حاصل از چاه های کوانتومی GaN/AlGaIn بر حسب چگالی آلایش سیلیکونی در دمای ۲K ۱۱۲
- شکل ۶-۱۰- طیف PL سه نمونه با آلایش سیلیکونی متفاوت از گروه اول که جفت شدگی

- LO فونون ها در آنها قابل مشاهده و قابل مقایسه می باشد به شدت جفت شدگی
 ۱۱۳ شدیدتر در نمونه بدون آلایش توجه کنید.
- شکل ۶-۱۱- وابستگی دمایی زمان واهلش در انرژی پیک PL حاصل از QW ها به دما برای
 ۱۱۴ دو نمونه بدون آلایش و بیشترین آلایش سیلیکونی
- شکل ۶-۱۲- مقادیر اندازه گیری شده زمان واهلش (مثلثهای تو خالی) و مقادیر محاسبه
 ۱۱۶ شده زمانهای بازترکب تابشی، τ_R ، و غیرتابشی، τ_{NR} ، در دماهای مختلف برای نمونه بدون آلایش
- شکل ۶-۱۳- مقادیر اندازه گیری شده زمان واهلش (مثلثهای تو خالی) و مقادیر محاسبه
 ۱۱۷ شده زمانهای بازترکب تابشی، τ_R ، و غیرتابشی، τ_{NR} ، در دماهای مختلف برای نمونه با بیشترین آلایش
- شکل ۶-۱۴- نمودارهای وابستگی دمایی طیف PL حاصل از نمونه های بدون آلایش و
 ۱۱۹ آلایش های $(\text{cm}^{-3}) 9 \times 10^{19}$ و $(\text{cm}^{-3}) 3 \times 10^{18}$ همراه با بستگی دمایی انرژی پیک PL حاصل از این نمونه ها
- شکل ۶-۱۵- وابستگی به زمان طیف فوتولومینسانس حاصل از نمونه بدون آلایش در
 ۱۲۱ ۶۰۰ ps اولیه بعد از تابش نور لیزر
- شکل ۶-۱۶- وابستگی به زمان طیف فوتولومینسانس حاصل از نمونه های با آلایش های
 ۱۲۳ $(\text{cm}^{-3}) 3 \times 10^{18}$ و $(\text{cm}^{-3}) 3 \times 10^{18}$ در دمای ۲ K
- شکل ۶-۱۷- نمودارهای وابستگی به شدت نور لیزر طیف فوتولومینسانس در نمونه های
 ۱۲۵ بدون آلایش و آلایش سیلیکونی $(\text{cm}^{-3}) 9 \times 10^{19}$ و $(\text{cm}^{-3}) 6 \times 10^{18}$ در دمای ۲ K

فهرست جداول

صفحه	عنوان
۹	جدول ۱-۱- انرژی گاف نواری تعدادی از نیمه رساناهای پرکاربرد بر حسب الکترون ولت در دمای ۳۰۰k
۱۷	جدول ۱-۲- ثابت شبکه تری نیترایدها در ساختار ورتسایتس در دمای اتاق
۲۵	جدول ۲-۲- زیرلایه های متداول برای رشد تری نیترایدها همراه با مقدار درصد عدم انطباق آنها نسبت به GaN
۶۶	جدول ۱-۴- مقادیر اندازه گیری شده ومحاسبه شده نسبت انفصال نواری نوار رسانش به ظرفیت در گروه تری نیترایدها
۷۷	جدول ۱-۵- مقادیر قطبش خودبه خودی و پیزوالکتریک، ثابت های پیزوالکتریک مهم، ثابت های الاستیک و ثابت شبکه برای تری نیترایدها
۸۱	جدول ۲-۵- میزان آلایش Si، پهنای چاه، درصد آلومینیم و پهنای سد در چاه های کوانتومی مورد بررسی (همه نمونه ها در سد آلایش یافته اند)
۱۲۰	جدول ۱-۶- انرژی جایگزیدگی اکسیتون ها در چاه های کوانتومی GaN/AlGaN در آلایش های سیلیکونی مختلف

همانگونه که می دانیم توسعه تکنولوژی نیمه هادیها تأثیر ژرفی در تمام زمینه های زندگی مدرن امروزی داشته است. اتم نیتروژن به دلیل داشتن الکترونگاتیوی بالا و شعاع کم در مقایسه با دیگر عناصر گروه پنجم جدول تناوبی، با عناصر گروه سوم ایجاد پیوندهای قوی می کند. این ترکیبات خواص جالب توجه ای از خود بروز می دهند تا حدی که این ترکیبات در تقسیم بندی نیمه هادی ها نام جداگانه ای را به خود اختصاص داده و به ترکیبات III-N معروف می باشند. هدف این پایان نامه بررسی اثر میدان های قطبشی موجود در ناحیه چاه یکسری از چاه های کوانتومی چندگانه ساخته شده از این ترکیبات (تری نیترایدها) به روش فوتولومینسانس می باشد.

نیمه هادیهای نیتروژندار که شامل ترکیبات InN و AlN و GaN می باشند، به دلیل داشتن ویژگی های منحصر به فرد از جمله گاف انرژی پهن و گسترده ($0.7 - 6.2\text{eV}$) که محدوده وسیعی از طیف الکترومغناطیسی از IR تا UV را شامل می شود، دارای کاربردهای زیادی در قطعات اپتوالکترونیکی می باشند که از آن جمله کاربرد در ساخت دیودهای نوری (LED ها) و دیودهای لیزری (LD ها) و آشکارسازها و صفحات نمایشگر رنگی (LCD) و ... می باشد. نیمه هادی های نیتروژندار علاوه بر کاربردهای اپتوالکترونیکی در ساخت قطعات الکترونیکی نیز به طور گسترده مورد استفاده قرار می گیرند، به ویژه این مواد در ناحیه دماهای بالا و فرکانس های بالا و همچنین در ساخت قطعات توان و سنسورهای گرمایی به خدمت گرفت شده اند. همچنین فراهم شدن گسیل تابشی در ناحیه آبی و فرابنفش توسط تعدادی از این نوع ترکیبات نیتروژندار منجر به عرضه DVD هایی با گنجایش 4.7GB در مقایسه با 0.67GB CD های با ظرفیت 0.67GB در سال ۱۹۹۶ شد. در نتیجه این پتانسیل وسیع کاربردها برای خانواده تری نیترایدها آنها را در مقایسه با سایر نیمه هادی ها بسیار سودمند ساخته است. به منظور افزایش بازدهی نوری این قطعات بجای کار با نیم رساناهای کپه ای، در ناحیه فعال قطعات اپتوالکترونیکی از چاه های کوانتومی و ساختارهای با ابعاد نانو استفاده می شود که کاملاً نسبت به نیم رساناهای کپه ای ارجح تر هستند. دلیل اصلی این موضوع اثر محدودیت کوانتومی^۱ که منجر به افزایش همپوشانی توابع موج الکترون و حفره می شود، می باشد. نمونه های مورد مطالعه در این پایان نامه که چاه های کوانتومی پنج گانه از GaN/AlGaIn می باشد، بمنظور

^۱ Quantum Confinement

تحقیق در همین راستا و برای ساخت دیوده‌های نوری و دیوده‌های لیزری طراحی شده‌اند. در نانوساختارهای نیتروژن دار بعلت عدم انطباق که در ثابت شبکه لایه‌های رشد داده شده بر روی یکدیگر وجود دارد کرنشی در ساختار بوجود می‌آید که در اثر آن بارهای قطبشی در سطح مشترک لایه‌ها بوجود می‌آید و این بارهای قطبشی به نوبه خود تولید میدان‌های قطبشی در نمونه خواهند کرد. این میدان‌های قطبشی باعث می‌شوند که چاه‌های کوانتومی از حالت مسطح خارج شده و تبدیل به چاه‌های مثلثی شوند و در نتیجه ترازهای انرژی را در این نانوساختارها دستخوش تغییر خواهند کرد. لذا بر روی فوتولومینسانس حاصل از آنها به شدت تأثیر می‌گذارند. هدف اصلی این پروژه نیز بررسی اثر این میدان‌ها روی تابش گسیلی از این نانوساختارها می‌باشد.

نمونه‌ها توسط پروفیسور *آمانو*ⁱ و همکارانشان در دانشگاه میجو ژاپن با روش رسوب گذاری بخار شیمیایی مواد آلی فلزیⁱⁱ ساخته شده‌اند و توسط آقای دکتر *هراتی زاده* (استاد راهنمای پروژه) و همکارانشان و با هدایت پروفیسور *مونمار*ⁱⁱⁱ در دانشگاه لینشوپینگ سوئد مورد آزمایش فوتولومینسانس و فوتولومینسانس وابسته به زمان قرار گرفته‌اند و داده‌های تجربی حاصل از اندازه‌گیری‌های اپتیکی در دانشگاه صنعتی شاهرود با استفاده از نرم افزارهایی از قبیل Origin ، Matlab و Peakfit مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته‌اند.

این پایان نامه شامل دو بخش اصلی می‌باشد. بخش اول آن شامل ۶ فصل است و در فصل‌های اول و دوم آن به ترتیب نیمه هادیها و نیمه رساناهای نیتروژندار و آلیاژهای آنها به طور مختصر معرفی می‌شوند و ساختار بلوری و نواری و دیگر خواص فیزیکی آنها مورد بحث قرار می‌گیرد. در فصل سوم تکنیک اندازه‌گیری فوتولومینسانس و فوتولومینسانس وابسته به زمان که برای مطالعه اپتیکی نمونه‌ها مورد استفاده قرار گرفته‌اند شرح داده شده است. در فصل چهارم نانوساختارهای کوانتومی نیتروژندار شامل چاه‌های کوانتومی، سیم‌های کوانتومی^{iv} و نقاط کوانتومی^v و انواع آنها مورد بحث قرار می‌گیرد. در فصل پنجم ساختار نمونه‌های مورد مطالعه در این پروژه و همچنین انواع میدان‌های قطبشی موجود در چاه‌های کوانتومی GaN/AlGaN معرفی و منشأ به وجود آمدن آنها مورد

ⁱ H. Amano

ⁱⁱ Metal Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD)

ⁱⁱⁱ B. Monemar

^{iv} Quantum Wire(QWi)

^v Quantum Dots(QDs)

بحث قرار می گیرد و نتایج یکسری از کارهای تئوری و آزمایشگاهی که بر روی نمونه های مشابه با نمونه های مورد مطالعه در این پروژه انجام گرفته ذکر می گردد. در نهایت در فصل ششم نتایج داده های تجربی بدست آمده از آزمایش های فوتولومینسانس مورد بحث فیزیکی قرار گرفته و به طور مفصل در مورد چگونگی استتار میدان های داخلی توسط حامل های نوری و آلایشی و همچنین اثر دما بر روی انرژی گسیلی تراز پایه چاه کوانتومی GaN/AlGaN و نکات دیگر بحث می شود.

بخش دوم پایان نامه شامل مقالاتی است که در ارتباط با موضوع پایان نامه به ژورنالهای بین المللی و داخلی و کنفرانس های بین المللی و داخلی ارائه شده است و مشتمل بر شش مقاله می باشد. مقاله اول در یازدهمین گردهمایی فیزیک ماده چگال که در مرکز تحصیلات تکمیلی در علوم پایه زنجان (۶-۵ خرداد ۱۳۸۴) برگزار شد، ارائه گشت و مقاله دوم در کنفرانس زیر پذیرفته شده است:

6th Internatinal Conference on Nitride Semiconductors (ICNS6), Bremen, Germany
August 28 - September 2, 2005

و در ژورنال Phys. Stat. Sol. چاپ خواهد شد. مقاله سوم و چهارم در کنفرانس سالیانه انجمن فیزیک ایران (۷-۱۰ شهریور ۱۳۸۴ - دانشگاه لرستان) پذیرفته شده و ارائه شده اند. مقاله پنجم accept برای چاپ در ژورنال Iranian Journal of Science & Technology شده است. مقاله ششم نیز برای چاپ به ژورنال European Physical Journal فرستاده شده است.

فصل ۱:

مفاهیم اساسی در بلورهای نیمه رسانا و خصوصیات آنها

▪ مواد نیمه رسانا وسیر تحول آنها

مواد نیم رسانا و سیر تحول آنها

تا کمتر از یک قرن پیش فقط دو دسته از مواد شناخته شده بودند: فلزها و عایقها. بتدریج و با پیشرفت علوم مواد نیمه هادی نیز به این دسته بندی اضافه شدند. نیمه رساناها گروهی از مواد هستند که رسانایی الکتریکی آنها بین فلزات و عایق ها قرار دارد. بلور کامل و خالص اغلب نیمه رساناها در صفر مطلق عایق است. نیمه هادیها رساناهای الکتریکی هستند که مقاومت ویژه آنها در دمای اتاق عموماً در گستره $(\Omega\text{-cm})$ $10^{-9} - 10^{-2}$ واقع است. این گستره در بین مقاومت ویژه رساناهای خوب، $(\Omega\text{-cm})$ 10^{-6} ، و عایق ها، $(\Omega\text{-cm})$ $10^{14} - 10^{22}$ ، قرار دارد. ویژگی مهم این مواد این است که رسانایی آنها با تغییر دما، تحریک نوری و میزان آلاینش به نحو قابل ملاحظه ای تغییر می کند. این قابلیت تغییر خواص الکتریکی، مواد نیمه رسانا را انتخاب مناسبی برای تحقیق در زمینه قطعات الکترونیکی ساخته است [۱]. مواد نیمه هادی جزء اصلی برای ساخت وسایل الکترونیکی و اپتوالکترونیکیⁱ هستند و در گستره وسیعی از محصولات و کاربردهای جدید می توان آنها را پیدا کرد به عنوان مثال در کامپیوترها، ساعت های دیجیتالی، نمایشگرهای LCD، قطعات اپتوالکترونیکی، تلفن های موبایل و ... بنابراین به جرأت می توان گفت توسعه تکنولوژی نیمه هادیها تاثیر ژرفی روی تمام زمینه های زندگی مدرن امروزی داشته است. با اختراع ترانزیستور پیوندی دو قطبی علاقه به مطالعه و تحقیق روی مواد نیمه هادی به طور قابل ملاحظه ای افزایش یافته است. بررسی هایی که منجر به این اختراع مهم شد باعث شد که *شاکلی*ⁱⁱ، *باردین*ⁱⁱⁱ و *براتین*^{iv} جایزه نوبل فیزیک در سال ۱۹۵۶ را از آن خود کنند [۲]. درک پیشرفته ای از اصول فیزیکی نیمه هادیها همراه با تلاش در ساخت وسایل با کیفیت بالاتر دو عنصر اصلی توسعه نیمه هادیها در سال های اخیر بوده است. یکی از بزرگترین

ⁱ Optoelectronic device

ⁱⁱ W. Shockely

ⁱⁱⁱ Bardeen

^{iv} W. Brattain

گامهای رو به جلو در توسعه تکنولوژی نیمه هادیها، اختراع تکنیکهای رشد برآراستی باریکه ملکولیⁱ و رسوب گذاری بخار شیمیایی فلزⁱⁱ بود؛ که باعث تولید انواع جدید مواد و ساختارهای جدید شامل لایه های بسیار نازک از نیمه هادیهای ناهمگون گردید [۳]. رایجترین مواد نیمه هادی در قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی سیلیکون (Si) و گالیم آرسناید (GaAs) هستند و علت آن نیز امکان تهیه کریستالهای خیلی خالص از آنها و نیز مسائل اقتصادی در ارتباط با تولید آنها می باشد، هر چند در زمینه کاربردهای اپتوالکترونیکی از قبیل ارتباطات فیبر نوری، Si به خاطر بازدهی پایین فرایند باز ترکیب تابشی در آن جای خود را کم کم به نیمه هادیهای با گاف نواری مستقیم و بازدهی تابشی بالاتر داد. [۲].

علی رغم کاربرد گسترده Si و GaAs در وسایل الکترونیکی، این دو ماده ضعفهایی به خاطر گاف نواری باریکشان دارند (۱/۱eV برای Si و ۱/۴eV برای GaAs) که شرایط را برای استفاده از این مواد در وسایلی که در دما و توان بالا کار می کنند نامناسب کرده است؛ چون الکترونهای نوار ظرفیت آنها به راحتی می توانند به طور گرمایی برانگیخته شوند [۴] و همچنین کاربردهای اپتوالکترونیکی آنها بخاطر تابش در محدوده طول موجی بلند محدود می شود. در مقابل نیمه رساناهای نیتروژندار و آلیاژهای آنها نوید مواد نیمه هادی با گاف نواری پهن را می دهند که می توانند بر بسیاری از مشکلات موجود در این رابطه غلبه کنند. به خاطر وجود گاف نواری مستقیم، تری نیترایدها و آلیاژهای آنها در مقایسه با مثلاً سیلیکون کرباید (SiC) که یکی دیگر از نیمه هادیهای با گاف نواری بزرگ ولی غیر مستقیم می باشد، می توانند تولید لومینسانسⁱⁱⁱ موثرتری بکنند. در طی دهه گذشته پیشرفت قابل ملاحظه ای در تابش کننده هایی که در محدوده طیفی سبز و طول موجهای کوتاهتر فعال هستند و قبلاً دسترسی به آنها مشکل بود، به وجود آمده است. اولین LED از GaN توسط پانکوف^{iv} [۵] در سال ۱۹۷۱ و اولین LED دارای پیوند p-n توسط آمانو^v [۶] در سال ۱۹۸۹ ساخته شد. هم اکنون دیودهای نوری آبی و سبز با درخشندگی زیاد، به طور تجاری در دسترس هستند [۷،۸]. در اکثر LED ها و LD ها ناحیه فعال گسیلنده نور دارای ساختاری که شامل یک لایه نازک (در حدود مقیاس

ⁱ Molecular Beam Epitaxy(MBE)

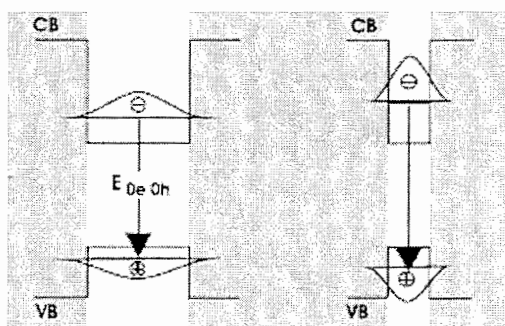
ⁱⁱ Metal Organic Chemical Vapor Deposition(MOCVD)

ⁱⁱⁱ Luminescence

^{iv} Pankov

^v Amano

نانومتر) از یک نیمه هادی است که بین دو لایه نیمه هادیهای دیگر با گاف نواری بزرگتر، ساندویچ شده می باشد. این نانوساختارهایⁱ دو بعدی چاه کوانتومیⁱⁱ نامیده می شوند. با تغییر پارامترهای این ساختار، برای مثال گاف نواری لایه ها، پهنای چاه، و ... این امکان وجود دارد که محدودیت حاملها و انرژی گسیلی از چاه کوانتومی تحت کنترل قرار گیرد. برای مثال در شکل ۱-۱ اثر پهنای چاه کوانتومی بر روی جابجایی ترازهای انرژی در یک چاه کوانتومی به طور شماتیک نشان داده شده است. بررسی فرایند گسیل نور در چاه های کوانتومی کمک می کند تا مشخصه و ویژگیهای وسایلی که از آنها استفاده می کنند را بفهمیم و نحوه کارکرد آنها را بهبود ببخشیم. در حقیقت این پتانسیل وسیع کاربردها برای نیمه هادیهها، آنها را در مقایسه با دیگر مواد بسیار سودمند و مفید ساخته است و از نقطه نظر علمی، همین گستره وسیع کاربرد آنها تلاشها را برای درک خواص پایه ای آنها توجیه می کند[۹].



شکل ۱-۱: اثر تغییر پهنای چاه بر روی ترازهای انرژی در یک چاه کوانتومی تنهاⁱⁱⁱ (SQW)

یکی از مهمترین مشخصات نیم رساناها که آنها را از فلزات و عایق ها متمایز می کند گاف انرژی آنهاست. گاف انرژی تعیین کننده طول موج هایی است که توسط نیم رسانا جذب یا گسیل می شود. به دلیل تنوع گسترده شکاف انرژی نیم رساناها، می توان طبقه بندی جدیدی از نیمه رساناها با توجه به این پارامتر ایجاد کرد. به عنوان مثال انرژی گاف نواری *GaAs* در دمای اتاق در حدود ۱/۲eV می باشد که مربوط به طول موج های نوری نزدیک به زیر قرمز می باشد. برعکس *GaP* دارای انرژی

ⁱ Nano structure

ⁱⁱ Quantum well (QW)

ⁱⁱⁱ Single Quantum Well

گاف نواری $2/26\text{eV}$ است که طول موج های قسمت سبز طیف الکترومغناطیسی را می پوشاند؛ همچنین مقدار انرژی گاف در مورد نیمه رسانای GaN در حدود $3/44\text{eV}$ (در دمای اتاق) می باشد که در ناحیه UV می باشد. در جدول ۱-۱ انرژی گاف نواری چند نیمه رسانای مهم در دمای اتاق داده شده است.

جدول ۱-۱: انرژی گاف نواری، E_g ، تعدادی از نیمه رساناهای پرکاربرد برحسب الکترون ولت در دمای 300 K [۱۰]

نیمه رسانا	GaP	GaAs	GaSb	InP	InAs	Si	GaN	C	InN
انرژی									
گاف نواری	۲/۲۶	۱/۴۲	۰/۷۲	۱/۳۵	۰/۳۶	۱/۱۲	۳/۴۴	۵/۴۷	۶/۲۰
$E_g(\text{eV})$									

بایستی اشاره کنیم که گاف انرژی در نیمه رساناها با فشار و دما تغییر می کند. ترازهای انرژی در بلور به وضوح توابعی از فواصل بین اتمی هستند، در نتیجه وقتی که دما یا فشار تغییر کند، فواصل بین ترازهای انرژی و E_g نیز تغییر می کنند. انرژی گاف را می توان به صورت زیر نوشت [۱۱]:

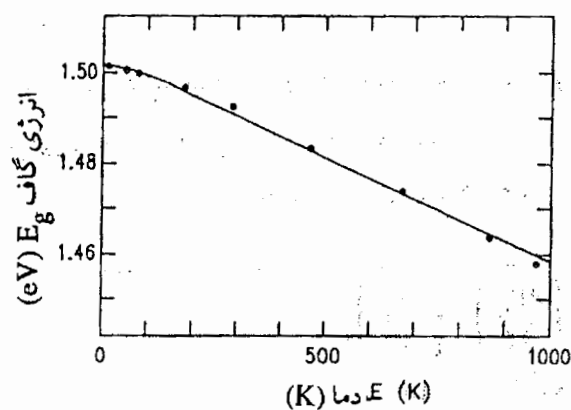
$$E_g = E_g^0 + \left[\frac{\partial E_g}{\partial P} \right]_T \Delta P + \left[\frac{\partial E_g}{\partial T} \right]_P \Delta T \quad (1-1)$$

که E_g^0 انرژی گاف در $T=0$ در غیاب هرگونه فشار خارجی، تغییرات E_g با دما در حدود $0/1\text{ (meV/K)}$ و تغییرات آن با فشار در حدود $10^{-9}\text{ (meV/dyn cm}^{-2}\text{)}$ است. برای نیمه رساناهای مختلف این اعداد می توانند مثبت و یا منفی باشند. معمولاً وقتی که دما افزایش پیدا می یابد، گاف انرژی کوچک می شود. مع ذالک نیمه رساناهایی مانند $CuCl$ وجود دارند که گاف انرژی آنها با دما افزایش پیدا می کند. در شکل ۱-۲ بستگی گاف انرژی $GaAs$ به دما نشان داده شده است [۱۱]. با تغییر دما در یک نیمه هادی اثرات متعددی در شبکه بوجود می آید. نوسانات اتمها پیرامون مکان میانگین شان افزایش یا کاهش خواهد یافت. واکنش الکترون با شبکه نیز با دما تغییر می کند. پتانسیل ناخالصیهای بخشنده و پذیرنده کم عمق نیز از دما تاثیر می پذیرد، هرچند انرژی یونیزاسیون ناخالصیها نسبتاً ثابت می ماند. مشاهدات تجربی نشان دهنده تغییر گاف انرژی با دما می باشد. این

وابستگی در محدوده های دمایی متفاوت تغییر می کند و تقریباً از رابطه تجربی زیر که برای اولین بار توسط ورشنی^۱ ارائه شد برای نیمه رساناهای کپه ای، پیروی می نماید [۱۲]:

$$E_g(T) = E_g(0) - \alpha T^2 / (\beta + T) \quad (۲-۱)$$

$E_g(0)$ انرژی گذار در دمای صفر کلوین است و α و β ثوابتی هستند که با تطبیق اطلاعات اندازه گیری شده بدست می آیند.



شکل ۲-۱: بستگی گاف انرژی گالیم آرسناید به دما [۱۱]

^۱ Varshni

- [۱] B.G. Streetman, *Solid State Electronic Devices*, Third Edition, Prentice-Hall (1990).
- [۲] T. Lundstrom; *Theoretical and optical investigation of some III-V based quantum wells and modulation doped heterostructures*; dissertation No.489, Linkoping University- IFM, (1996).
- [۳] A. C. Ferreira; *Optical and Transport Studies of Highly Acceptor Doped GaAs/AlGaAs Quantum Wells*; dissertation No.450, Linkoping University- IFM, (1996).
- [۴] S. M. Sze; *Physics of Semiconductor device*; John willy&Sons, New York (1981).
- [۵] J. I. Pankove; E. I. Miller; J. E. Berkeyheiser; *RCA Rev.* **32**, 383 (1971).
- [۶] H. Amano; M. Kito; K. Hiramatsu; I. Akasaki; *Jap. J. Appl.Phys.* **28** L2112 (1989).
- [۷] S. Nakamura; M. Senoh; N. Iwasa; S. I. Nagahama; T. Yamada and T. Mukai; *Super Bright green InGaN single Quantum Well structure light emitting diodes*; *Jpn. J. Appl. Phys.* **34** , L1332 (1995).
- [۸] S. Nakamura; M. Senoh; N. Iwasa and S. I. Nagahama; *High power InGaN single quantum well structure blue and violet light emitting diodes*; *J. Appl. Phys. Lett.* **67** , 1868 (1995).
- [۹] H. Haratizadeh; *Optical Characterization of GaN/AlGaIn Quantum Well Structures*; dissertation No.489, Linkoping University- IFM, (2004).
- [۱۰] J. Singh; *Semiconductor Optoelectronics*; Mc Grow-Hill. Inc. (1995).
- [۱۱] مقدمه ای بر نورشناخت نیمه رساناها، ناصر پیغمبریان، استفان کوچ، آندره میزیروویچ، ترجمه دکتر حمید رضا مهاجری مقدم، دکتر حبیب تجلی، چاپ اول، انتشارات آستان قدس رضوی، (۱۳۸۰).
- [۱۲] M. Leroux; N. Grandjean; B. Beaumont; G. Nataf; F. Semord; J. Massies and P. Gibart; *J. Appl. Phys.* **86** , 3721 (1999).

فصل ۲:

ساختار بلوری و نواری نیمرساناهای نیتروژن‌دار (III-N)

- مقدمه
- ساختار بلوری نیمه رساناهای نیتروژن دار (III-N) و ثابت شبکه آنها
- آلیاژهای AlGaN
- ساختار نواری تری نیترایدها
- رشد بلورهای گروه III-N

۲-۱- مقدمه

الکترون‌گاتیوی بالا و شعاع کم نیتروژن در مقایسه با دیگر عناصر گروه پنجم، همچنین پیوند قوی با عناصر گروه سوم باعث ایجاد خواص جالبی در ترکیب نیتروژن با عناصر گروه سوم شده است، بطوریکه ترکیب عناصر گروه سوم با نیتروژن گروه ویژه ای از نیمه هادیها را تحت عنوان "تری نیترایدها"ⁱ یا نیمه رسانا های نیتروژندار بوجود آورده است. در حالی که بحث اصلی در این پایان نامه بررسی اثر میدانهای قطبشی در چاه های کوانتومی حاصل از گروه تری نیترایدها می باشد، ولی این موضوع برای ما قابل درک نخواهد بود مگر اینکه خواص نیمه رساناهای گروه تری نیتراید را در ابتدا بررسی کنیم. لذا در این فصل به طور خلاصه به ویژگی های ساختاری و ساختار نواری ترکیبات III-N که جزء اصلی تشکیل دهنده نمونه های مورد مطالعه در این تز هستند، می پردازیم.

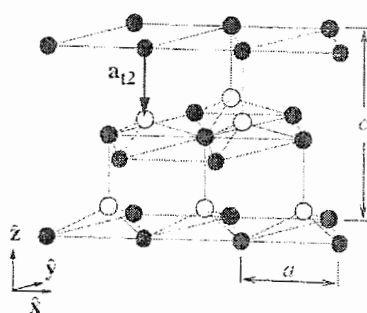
۲-۲- ساختار بلوری نیمه رساناهای نیتروژن دار(III-N) و ثابت شبکه آنها

سه ساختار کریستالی متداول برای گروه تری نیترایدها وجود دارد: ساختارهای ورتسایتس، زینک بلند و سنگ نمکⁱⁱ. البته ساختار پایدار برای AlN و GaN و InN کپه ای، از نظر ترمودینامیکی، ساختار ورتسایتس است. وجود ساختار زینک بلند برای GaN و InN به وسیله رشد روشنی لایه های نازک روی صفحات بلوری (۰۰۰۱) زیر لایه های مکعبی از قبیل Si، MgO، GaAs ثابت شده است. با وجود اینکه انتظار می رود نیترایدهایی که در ساختار مکعبی تبلور می یابند فواید تکنیکی زیادی در خواص الکتریکی داشته باشند، ولی بلور با کیفیت بالا به علت شبه پایداری فرم مکعبی، به آسانی به دست نمی آید. AlN و GaN و InN وقتی که تحت فشارهای خیلی زیاد باشند، در ساختار

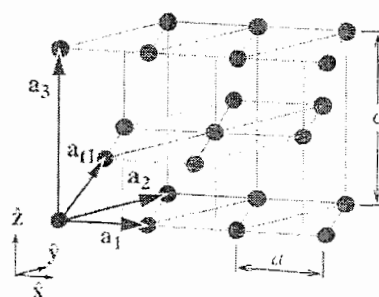
ⁱ III-Nitrides

ⁱⁱ Rock salt

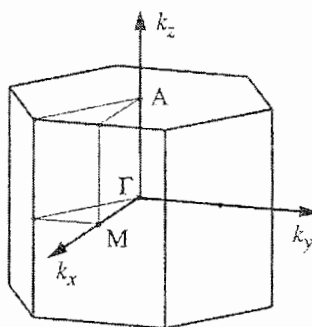
سنگ نمک متبلور می شوند. ساختار ورتسایتس سلول واحد هگزاگونال دارد و در نتیجه دو ثابت شبکه a و c خواهد داشت و شامل شش اتم از هر نوع در سلول واحد است. ساختار ورتسایتس از دو شبکه hcp^1 ، هر کدام با یک نوع از اتمها، که به اندازه $\frac{3}{8}$ بردار c در هم فرو رفته اند ساخته شده است (شکل ۱-۲- الف و ب). منطقه اول بریلوئن این ساختار نیز در شکل ۱-۲- ج نشان داده شده است [۱،۲].



(ب)



(الف)



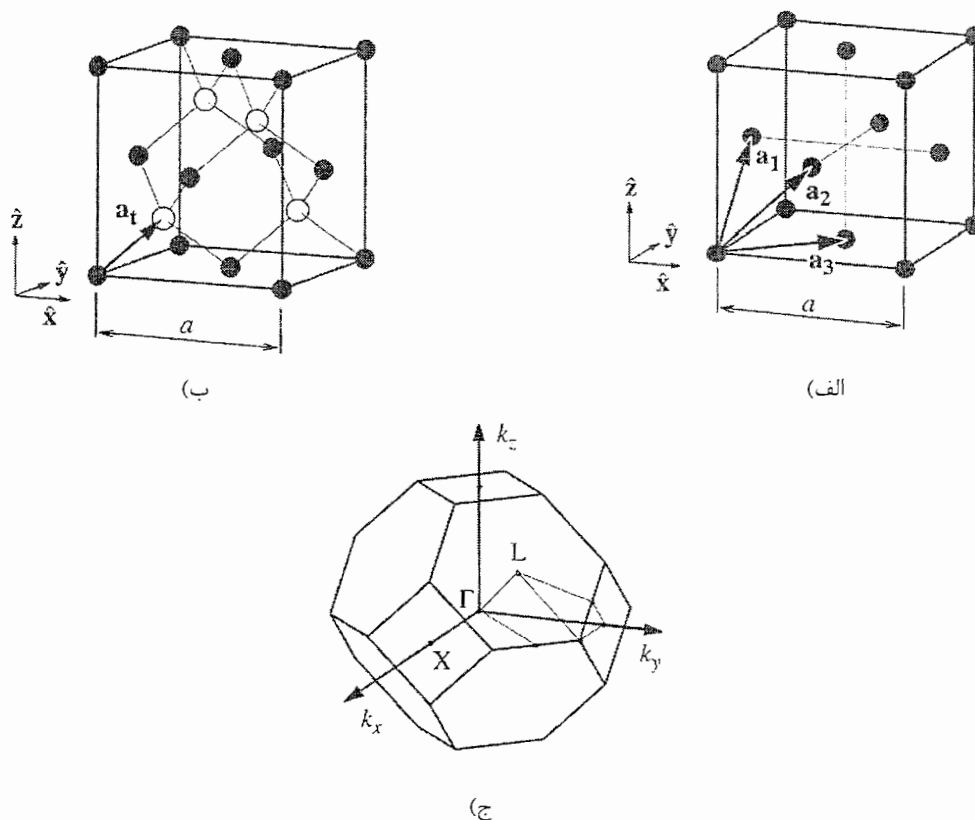
(ج)

شکل ۱-۲: ترتیب قرارگیری اتمها در یک ساختار الف) hcp و ب) ورتسایتس (WZ). دو ثابت شبکه a و c نیز نشان داده شده اند. ج) نمایش منطقه اول بریلوئن ساختار ورتسایتس (نقاط با تقارن بالای A و M و Γ نیز نشان داده شده اند). [۳]

ساختار زینک بلند تری نیترایدها یاخته بسیط مکعبی دارد که شامل ۴ اتم از گروه III و ۴ اتم نیتروژن است. موقعیت قرارگیری اتمها در سلول واحد مانند ساختار بلوری الماس است. هر دو ساختار از دو شبکه fcc در هم فرو رفته به اندازه $\frac{1}{4}$ قطر اصلی، تشکیل شده اند. هر اتم در این بلور به نظر می آید

¹ Hexagonal close-packed

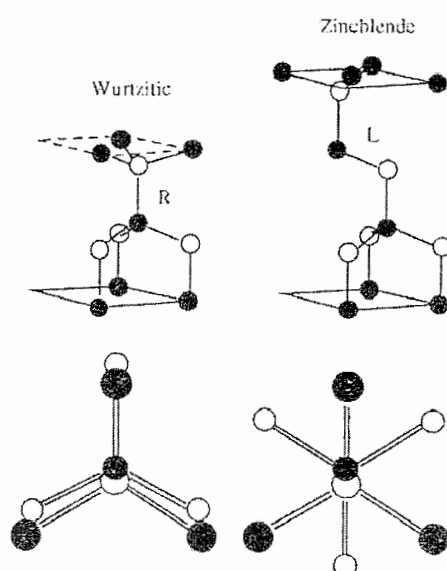
که در مرکز یک چهار وجهی می باشد (شکل ۲-۲-ب). منطقه اول بریلوئن یک بلور زینک بلند در شکل ۲-۲-ج رسم شده است.



شکل ۲-۲: ترتیب قرارگیری اتمها در الف) سلول واحد شبکه fcc و ب) سلول واحد ساختار زینک (ZB). ثابت شبکه a نیز نشان داده شده است. ج) نمایش منطقه اول بریلوئن ساختار زینک بلند (نقاط با تقارن بالای X و L و Γ نیز نشان داده شده اند). [۴]

ساختارهای ورتسایتس و زینک بلند از جهاتی مشابه اند. در هر دو مورد هر اتم گروه III به وسیله چهار اتم نیتروژن به عنوان نزدیکترین همسایه هایش محصور شده است و بالعکس، یعنی هر اتم نیتروژن توسط چهار اتم از گروه III محاصره شده است و اختلاف اصلی بین دو ساختار در نحوه چینش فشرده صفحات اتمی می باشد. برای ساختار ورتسایتس نحوه چینش صفحه (۰۰۰۱) به صورت ABABAB در جهت $\langle 0001 \rangle$ می باشد و برای ساختار زینک بلند، نحوه چینش صفحات (۱۱۱) به صورت ABCABC در جهت $\langle 111 \rangle$ می باشد. در شکل ۲-۳ این موضوع به خوبی نشان

داده شده است. همانگونه که از شکل ۳-۲ مشاهده می شود در بلور زینک بلند در جهت [۱۱۱] یک چرخش 60° وجود دارد که موجب به وجود آمدن چینش ABCABC می شود. اطلاع دقیق از ثابت شبکه نیمه هادیها خیلی مهم است زیرا اکثر وسایل ساخته شده از آنها از ساختارهای ناهمگون استفاده می کنند و ثابت شبکه دو ماده تشکیل دهنده ساختار ناهمگون بایستی با یکدیگر تطبیقⁱ داشته باشند، در غیر این صورت کرنش و تنشⁱⁱ در سطح مشترک پیوند ناهمگون به وجود خواهد آمد و منجر به دررفتگی در شبکه می شود و نحوه عملکرد قطعات را شدیداً مورد تأثیر قرار می دهد. در شکل ۴-۲ انرژی گاف نواری چند نیمه رسانای مهم بر حسب ثابت شبکه آنها نشان داده شده است. در ضمن ثابت های شبکه برای تری نیترایدهایی که دارای ساختار بلوری ورتسایتس هستند در جدول ۱-۲ داده شده است. به طور مثال شکل ۴-۲ نشان می دهد که مقدار عدم تطبیق ثابت شبکه برای ساختار ناهمگون GaN/AlN برابر با ۲/۵٪ و برای InN/GaN، ۱۱٪ است.

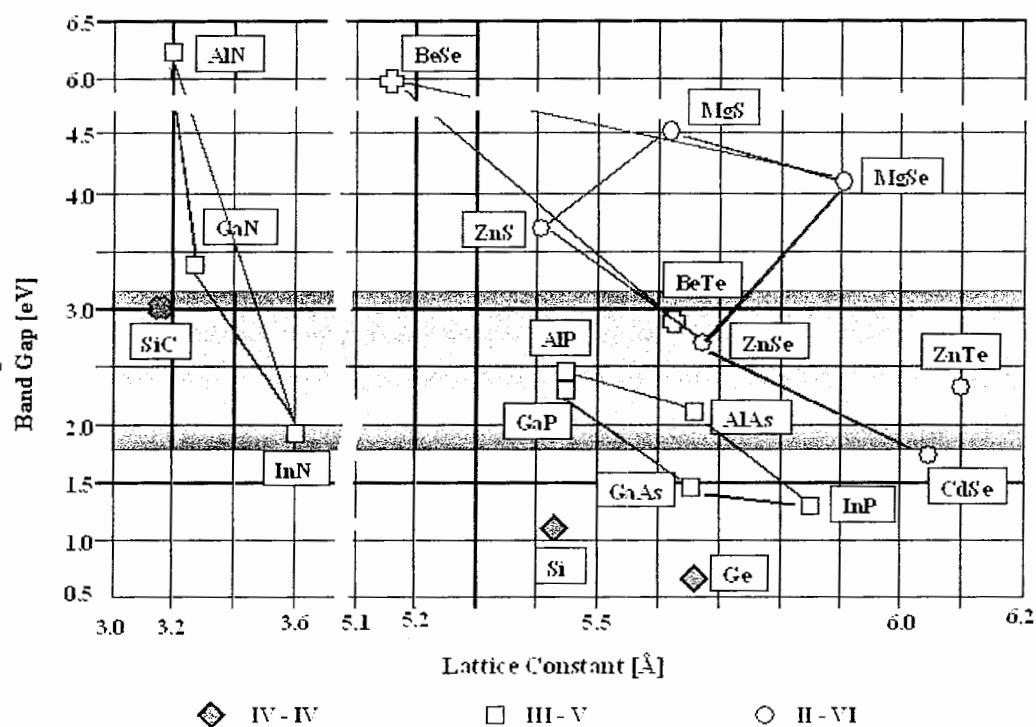


شکل ۳-۲: نحوه چینش اتمها در ساختارهای Wz و زینک بلند. به چرخش اتمها در ساختار زینک بلند توجه کنید [۱].

ⁱ match
ⁱⁱ stress

جدول ۱-۲: ثابت شبکه تری نیترایدها در ساختار ورتسایتس در دمای اتاق [۵]

	AlN	GaN	InN
$a (\text{\AA})$	$3/110 \pm 0/002$	$3/1892 \pm 0/0009$	$3/540 \pm 0/008$
$c (\text{\AA})$	$4/978 \pm 0/002$	$5/1850 \pm 0/0005$	$5/8 \pm 0/10$



شکل ۲-۴: انرژی گاف نواری بر حسب ثابت شبکه (انرژی گاف نواری InN اخیراً مقدار 0.7 الکترون ولتⁱ گزارش شده است که کاملاً معتبر می باشد)ⁱⁱ

۲-۲-۱- گالیم نیتراید (GaN)

اولین بار گالیم نیتراید حدود ۷۰ سال پیش توسط یوهانسونⁱⁱⁱ در سال ۱۹۳۲ [۶] و سپس توسط جوزا و هاهن^{iv} در سال ۱۹۳۸ [۷] با عبور دادن آمونیاک از روی گالیم گرم سنتز شد. دو دهه بعد

ⁱ J. Wu, W. Walukiewicz, K. M. Yu, J. W. Ager III, E. E. Haller, Hai Lu, and William J. Schaff, Phys. Stat. Sol. (b) **240**, 412 (2003).

ⁱⁱ http://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/semi_en/kap_5/backbone/r5_1_4.html

ⁱⁱⁱ Johnson

^{iv} Hahn and Juza

جرمیس و همکارانشⁱ در سال ۱۹۵۹ [۸] همین تکنیک را بکار بردند و بلورهای کوچکی از GaN را تولید کردند و طیف فوتولومینسانس حاصل از آن را اندازه گیری کردند. یک دهه بعد ماروسکا و تیتجنⁱⁱ [۹] از بخار شفاف کلراید استفاده کردند تا یک لایه تک کریستال بزرگ روی sapphire تولید کنند. اگرچه GaN بیش از دیگر نیمه رساناهای نیتروژندار مورد مطالعه قرار گرفته است ولی هنوز نیاز بسیاری برای بررسی های بیشتر وجود دارد تا دانش خود را در مورد آن به سطح آگاهی که نیمه رساناهایی از قبیل Si و GaAs نزدیک کنیم. GaN آسانتر از سایر مواد تری نیتراید رشد پیدا می کند ولی علی رغم پیشرفت تکنولوژی رشد بلور، GaN رشد یافته دارای نواقص شبکه نسبتاً فراوان و غلظت ذاتی الکترونی به میزان بیش از 10^{16} cm^{-3} در دمای اتاق می باشد. فقدان دسترسی به زیر لایه های مناسب، از لحاظ تجاری، و مشکلات رشد نمونه هایی با آلایش نوع p در آن نیاز به تحقیق بیشتر در زمینه رشد و خصوصیات GaN را اجتناب ناپذیر کرده است. تا کنون در خصوص تهیه GaN با رسانندگی از نوع p تحقیقات گسترده ای انجام گرفته است [۱]. آکازاکیⁱⁱⁱ و همکارانش [۱۰] با استفاده از بازپخت^{iv} و آلایش با Mg گالیم نیتراید در دمای بالاتر از 750°C در گاز N_2 توانستند به این مقصود دست یابند. به غیر از Mg عناصر دیگری مانند Cd, Ge, In, Be و ... که یا در طی رشد الحاق می شوند و یا قبل از رشد بعنوان یون وارد شده اند، به صورت پذیرنده یا بخشنده عمل می کنند [۱]. اطلاعات قابل دسترس در مقاله ها و کتاب ها در مورد بسیاری از خواص گالیم نیتراید هنوز در حال تحول و تغییر است و ارقام گزارش شده بحث برانگیز هستند. بخشی از این موضوع پیامد این مطلب است که آزمایشات روی نمونه های با کیفیت های متفاوت انجام شده است. مطالعات اخیر منجر به پیشرفت در تکنولوژی رشد بلور GaN شده است و بسیاری از مشکلاتی که با آن مواجه بودیم، اکنون حل شده است به گونه ای که برخی از محققین موفق به ساخت گالیم نیتراید با کیفیت بالا و آلایش الکترونی زمینه $(10^{16} \text{ cm}^{-3})$ در دمای اتاق شده اند. اگرچه برای تعیین خواص فیزیکی مختلف GaN مانند خواص اپتیکی یا الکتریکی آن هنوز تحقیقات گسترده ای در حال انجام است.

ⁱ Grimmeiss et. al.

ⁱⁱ Maruska and Tietjen

ⁱⁱⁱ Akasaki et. Al.

^{iv} Annealing

۲-۲-۲- آلومینیم نیتراید (AlN)

آلومینیم نیتراید کوچکترین ثابت شبکه را در گروه تری نیترایدها دارد و دارای ویژگی های الکترونیکی و مکانیکی مفیدی می باشد که از آن جمله می توان سختی، رسانندگی گرمایی زیاد و مقاومت تا دمای های بالا را نام برد. گاف نواری پهن $E_g(300\text{ K}) = 6/20\text{ eV}$ ، AlN باعث شده است تا AlN به عنوان یک ماده عایق در کاربردهای وسایل نیمه هادی جا باز کند. هر چند اکثر توجهی که به این نیمه هادی شده ناشی از توانای اش در تشکیل آلیاژها با GaN و تولید AlGaIn و اجازه ساخت وسایل اپتیکی و الکترونیکی که بر پایه GaN/AlGaIn بوده و در گستره طول موجی سبز تا فرا بنفش فعال اند، می باشد. بررسی AlN نسبت به سایر مواد گروه تری نیتراید سخت تر است، چون واکنش پذیری آلومینیم با اکسیژن زیاد می باشد. AN در ساختار بلوری ورتسایتس دارای جرم مولی $40/495\text{ (gm/mol)}$ می باشد. فرم مکعبی آن به سختی حاصل می شود [۱]. از آنجائیکه شبکه AlN وابستگی بسیار شدیدی به واکنش با اکسیژن دارد و تقریباً حذف ناخالصی اکسیژن از آن غیر ممکن است، آلومینیم نیترایدی که هم اکنون به طور تجاری در دسترس است حدود ۱٪ تا ۱/۵٪ اکسیژن دارند. هریس^۱ و یانگمن^۲ فوتولومینسانس و کاتدولومینسانس AlN را بررسی کرده اند و بعد از تابش توسط نور فرابنفش، دریافتند که بلور AlN آلایش یافته با اکسیژن یک سری نوارهای لومینسانس پهنی را در نزدیک فرکانسهای فرا بنفش و در دمای اتاق از خود ساطع می کند [۱۲]. توسط گروه های دیگری AlN با کیفیت بالا، با جذب نوری تحلیل و بررسی شد و معین شد که در دمای اتاق گاف نواری آن مستقیم و مقدار آن $6/20\text{ eV}$ است. تعداد زیادی از گروهها مقادیر قابل قیاس با این عدد را گزارش کرده اند و در مقابل یکسری از آنها مقادیر کمتری را گزارش کرده اند، که احتمالاً بایستی به خاطر وجود اکسیژن در نمونه هایشان باشد [۱۳، ۱۴].

۲-۲-۳- ایندیم نیتراید (InN)

اطلاعات بدست آمده از InN در مقایسه با دیگر اعضای گروه تری نیترایدها (AlN و GaN) بسیار کمتر است؛ و علت اصلی آن ناپایداری InN در دماهای بالاتر از $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ است. علاقه و توجهی که

^۱ Harris
^۲ Youngman

نسبت به بررسی GaN و AlN پیدا شده بود برای InN فراهم نگشت و دلایل اصلی آن مشکلات در دسترسی به کریستالهای با کیفیت مطلوب و بالا از InN و همچنین وجود تعداد زیادی از نیمه هادی هایی بود که به خوبی مشخصه یابی و بررسی شده بودند و این نیمه رساناها دارای انرژی گاف نواری نزدیک به انرژی گاف نواری InN دارا می باشند که از آن جمله می توان به AlGaAs و Zn(Ga,Al)AsP، اشاره کرد. InN بدلیل فقدان زیر لایه مناسب و وجود غلظت نقایص محلی زیاد از جهت بررسی های ایتیکی و الکتریکی دارای مشکلات زیادی است. همانطور که ذکر شد به خاطر پایداری گرمایی کم InN این ماده در دماهای بالا که در فرآیند رشد نشست بخار شیمیایی^۱ (CVD) لازم است نمی تواند رشد داده شود. اختلاف زیاد شعاع اتمی In و N فاکتور دیگری است که مشکل به دست آوردن InN با کیفیت بالا را دامن می زند. InN به طور طبیعی در ساختار ورتسایتس متبلور می شود. البته InN در ساختار مکعبی (زینک بلند) نیز دیده شده است. نسبت c/a برای آن مقدار $0.008 \pm 1/615$ است که نزدیک به مقدار $1/633$ ، که از از لایه های با کیفیت رشد عالی بدست آمده، می باشد. بررسی گزارشات قبلی در مورد ثابت های شبکه این ماده نشان دهنده مقادیر a تقریباً یکسان و مقادیر c تا حدی پراکنده می باشد و دلیل آن احتمالاً به خاطر وجود کمبود نیتروژن میباشد، چون اتم های نیتروژن به طور فشرده ای در صفحات (۰۰۰۱) قرار دارند [۱].

۲-۳- آلیاژهای AlGaIn

در قطعات اپتوالکترونیکی به وفور از ساختارهای ناهمگون تری نیتراید استفاده می شود. برای این که درک عمیقی نسبت به مکانیسم فیزیکی که در پشت سر عملکرد این قطعات قرار دارد، پیدا کنیم بایستی آلیاژهای این مواد به طور کامل مورد بررسی قرار گیرد. بسیاری از این خواص فیزیکی از قبیل انرژی گاف نواری و جرم های موثر الکترون ها و حفره ها و ثابت دی الکتریک، به درصد مولی مواد بکار رفته در ترکیب ماده مورد بررسی بستگی دارد. اکثر ترکیباتی که در این تز بررسی شده اند ترکیبات سه تایی از تری نیترایدها هستند که از دو ترکیب دوتایی تشکیل شده اند که یک عنصر مشترک در آنها وجود دارد. برای مثال $Al_xGa_{(1-x)}N$ از GaN و AlN تشکیل شده که x درصد مولی AlN در

^۱ Chemical vapor deposition

ترکیب می باشد. ثابت شبکه برای آلیاژهای سه تایی $A_xB_{(1-x)}C$ توسط رابطه زیر که به قانون وگارد معروف است داده می شود [۱]:

$$a^{A_xB_{(1-x)}C} = a^{BC} + x(a^{AC} - a^{BC}) \quad (۱-۲)$$

در مورد انرژی گاف نواری، E_g ، این قانون به صورت زیر خواهد شد:

$$E_g^{A_xB_{(1-x)}C} = E_g^{BC} + x(E_g^{AC} - E_g^{BC}) + (x^2 - x)b^{ABC} \quad (۲-۲)$$

مقدار پارامتر b^{ABC} با فیت کردن عبارت فوق به گاف های نواری دو ترکیب دوتایی (E_g^{AC}, E_g^{BC}) بدست می آید [۱۵]. آگاهی کامل و دقیق از نحوه بستگی به مقدار درصد ترکیب مواد سد و چاه شرط ضروری در آنالیز کردن ساختارهای ناهمگون، چاه های کوانتومی و ابرشبکه ها می باشد. در بررسی نیمه هادی های نیتروژندار آزمایشگر دارای قابلیت زیادی در انتخاب مواد تشکیل دهنده سد و چاه می باشد؛ مثلاً سدها می توانند از AlGaIn یا GaN ساخته شوند و بسته به نوع ماده سد، چاه ها می توانند از لایه های GaN یا InGaIn ساخته شوند. در این صورت انرژی گاف نواری در ساختار $Al_xGa_{(1-x)}N$ طبق رابطه (۲-۲) از رابطه زیر بدست می آید [۱]

$$E_g(x) = xE_g(AlN) + (1-x)E_g(GaN) - bx(1-x) \quad (۳-۲)$$

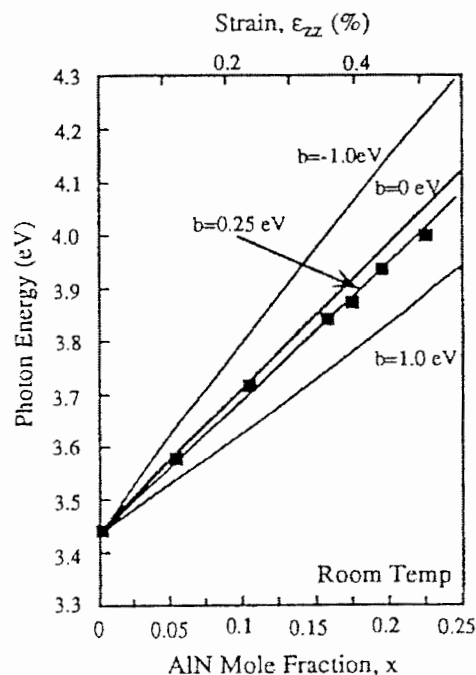
مقدار پارامتر b در گزارشات مختلف مقادیر کاملاً متفاوت و بحث برانگیزی دارد. شکل ۲-۵ بستگی انرژی گاف نواری AlGaIn به میزان x را که توسط آمانو ارائه شده است، را نشان می دهد [۱۶]. برای مثال یوشیداⁱ [۱۷] و همکارانش از آزمایشات خود نتیجه گرفتند که زمانیکه درصد مولی AlN افزایش پیدا می کند انرژی گاف نواری AlGaIn به سمت بالا شیفت پیدا می کند، که مبین مقدار منفی برای b می باشد و این کاملاً با نظر ویکنندنⁱⁱ [۱۸] که مقدار صفر را برای این پارامتر گزارش کرده در تضاد است. کویدⁱⁱⁱ [۱۹] نیز پارامتر b را مقداری مثبت گزارش کرده است. آکاساکی^{iv} و آمانو^{iv} گاف انرژی لایه $Al_xGa_{1-x}N$ را با استفاده از روش فتولومینسانس (PL) تعیین کردند و پارامتر b برای این ترکیب به ازای درصدهای مختلف Al بین صفر تا ۲۵ درصد حدود ۰/۲۵ بدست آوردند. در این تز از مقدار $b=۰/۲۵$ در محاسبه گاف نواری AlGaIn استفاده شده است [۱۶، ۲۰].

ⁱ Yoshida et. al.

ⁱⁱ Wickenden

ⁱⁱⁱ Koide

^{iv} Akasaki, and H. Amano. Inst. Phys. Conf. Ser. **142**, 7 (1996)



شکل ۲-۵: بستگی به میزان x انرژی گاف نواری AlGaIn که توسط گروه های مختلف اندازه گیری شده اند (مقدار $b = 0.25$ که در این تر از آن استفاده شده است، توسط آمانو گزارش شده است) [۱۶].

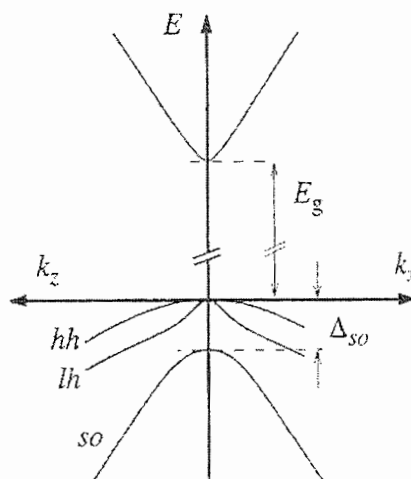
۲-۴- ساختار نواری نیترایدها

تری نیترایدهایی که در ساختار ورتسایتس متبلور می شوند، یاخته واحد بسیطⁱ آنها دارای ۲ اتم می باشد و در هر پیوندی که بین اتمها برقرار می شود ۸ الکترون شرکت دارند؛ ۳ الکترون از گروه تری نیترایدها و ۵ الکترون از عنصر نیتروژن تأمین می شود. پیوندها از بیرونی ترین اوربیتالهای اتمی s و p ساخته می شوند که برای تشکیل حالت های پیوندی و غیر پیوندیⁱⁱ هیبرید می شوند. حالت های پر به نوارهای ظرفیت موسوم هستند و حالت های اشغال نشده غیر پیوندی موسوم به نوارهای رسانش هستند. پایینترین نوار رسانش از هیبرید شدن اوربیتالهای s اتمی ساخته شده در حالیکه حالت های غیر پیوندی از اوربیتالهای p که در انرژی بالاتری هستند، ساخته می شوند [۲۱، ۲۲].

ⁱ Primitive unit cell

ⁱⁱ Anti-bonding

در یک نیمه رسانای با ساختار بلوری زینک بلند (ZB) مثل GaAs، نوارهای ظرفیت در نقطه Γ ($K=0$) تبهگن هستند در حالیکه نوار ظرفیت سوم که از نوع p می باشد، به وسیله شکافتگی ناشی از برهمکنش اسپین-مدار، Δ_{so} ، به سمت پایین شیفته پیدا می کند. در شکل ۶-۲ ساختار نواری در اطراف نقطه Γ برای یک نیمه رسانای مستقیم مثل GaAs نشان داده شده است. وقتی که از مرکز منطقه اول بریلوئن دور می شویم ($K \neq 0$) تبهگنی از بین رفته و نوارهای ظرفیت به نوارهای حفره سنگینⁱ (hh) و حفره سبکⁱⁱ (lh) شکسته می شوند. نوار سوم با نام split-off مشخص می شود.



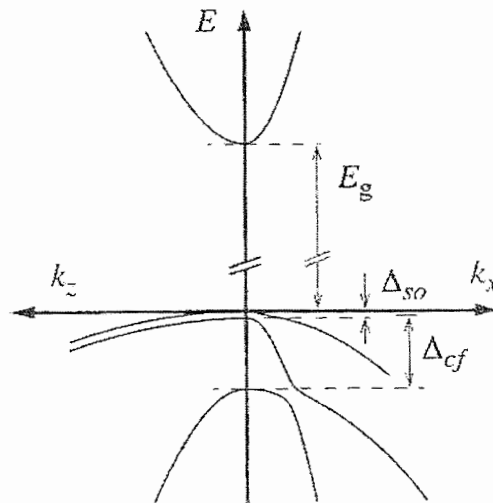
شکل ۶-۲: ساختار نواری محاسبه شده در نزدیکی نقطه Γ برای بلور GaAs که دارای ساختار زینک بلند می باشد [۲۱]

در ساختار بلوری ورتسایتس نوارهای ظرفیت در نقطه Γ به علت شکافتگی ناشی از برهمکنش اسپین-مدار و شکافتگی میدان کریستالی، Δ_{cf} ، غیرتبهگن هستند (به شکل ۷-۲ توجه کنید). نوار ظرفیت در اثر این دو پارامتر به سه نوار حفره سنگین (hh, Γ_9')، نوار حفره سبک (lh, Γ_7') و نوار شکافتگی اسپین مدار (CH, Γ_7') تجزیه می شود. بنابراین اختلاف اساسی بین ساختار نوار ظرفیت در شبکه های ZB و WZ در شکافتگی حاصل از میدان بلوری است. این میدان که متأثر از تقارن در ساختار بلوری است در ساختار ورتسایتس وجود دارد اما در ساختار زینک بلند به علت تقارن مکعبی، وجود ندارد؛ به همین دلیل در نوار ظرفیت ساختار زینک بلند شکافتگی نداریم. در مورد GaN

ⁱ Heavy hole

ⁱⁱ Light hole

دقیقترین اندازه گیری گاف نواری در بین همه گروه هایی که این اندازه گیری را انجام دادند مربوط به آقای بو مونمار^۱ می باشد. مونمار داده هایش را از نمونه فیلم روآراستی GaN با ساختار ورتسایتس که روی Sapphire رشد داده شده بود با استفاده از روشهای بازتاب اپتیکی و طیف نمایی تحریکیⁱⁱ بدست آورده است [۲۳].



شکل ۲-۷: ساختار نواری محاسبه شده در نزدیکی نقطه Γ برای بلور GaN که دارای ساختار ورتسایتس می باشد [۲۱]

۲-۵- رشد بلورهای گروه III-N

برای بررسی و شناخت هر نیمه رسانایی ابتدا لازم است آن را هرچه خالص تر تهیه کنیم؛ در این صورت هرچه نیمه رسانایی که تولید می شود بزرگتر و با کیفیت بهتر باشد، استفاده از آن در صنعت و تکنولوژی آسانتر و مطلوبتر است. البته بررسی شرایط رشد و کیفیت واقعی محصول بعد از تولید با انجام آزمایشهای ویژه تعیین می شود. از هنگام اختراع ترانزیستور در سال ۱۹۴۸ پیشرفت تکنولوژی قطعات حالت جامد نه تنها به توسعه مفاهیم قطعات الکترونیکی بلکه به بهبود مواد نیز وابسته بوده است. برای مثال واقعیت توانایی کنونی در ساخت مدارهای مجتمع حاصل پیشرفت های علمی قابل ملاحظه در زمینه رشد سیلیسیم تک بلور در آغاز و میانه دهه ۱۹۵۰ بوده است [۱۰]. یکی از مهمترین و متنوع ترین روشهای رشد بلور، رشد یک لایه نازک روی زیرلایه ای از یک بلور همسان است.

^۱ Bo Monemar

ⁱⁱ PL Excitation Spectroscopy

زیرلایه می تواند از همان ماده لایه رشد داده شده و یا ماده دیگری با ساختمان بلوری مشابه باشد. نشان دادن لایه تک بلوری جهت دار روی زیرلایه، رشد رونشستی یا رونشینی نامیده می شود. رونشینی از کلمه یونانی *epi* به معنای بالا و *taxis* به معنی نظم و ترتیب تشکیل شده است که روی هم به معنی تداوم نظم بخشیدن بلور به روی زیر لایه است. روشهای مختلفی برای تأمین اتمهای مورد نظر روی سطح لایه رشد کننده وجود دارد ولی در این پایان نامه به دو روش اصلی به اختصار اشاره می شود: روش MOCVD و MBE روش اول به این دلیل که نمونه های آزمایش شده در این پایان نامه با این روش ساخته شده اند و روش دوم به این دلیل که روش بسیار دقیق و پرکاربردی است.

۲-۵-۱- زیرلایه های متداول در رشد بلورهای گروه III-V

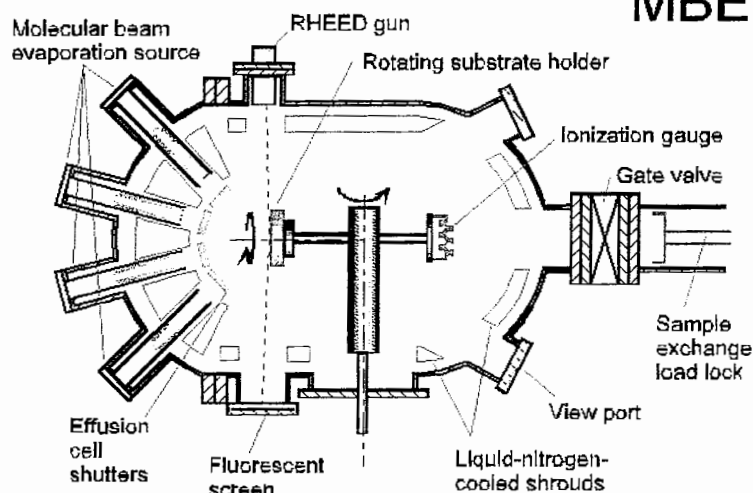
نیمه هادیهای گروه III-V روی زیرلایه های مختلفی از جمله SiC و Si و ZnO و Mg و Sapphire رشد داده شده اند. در اینجا ما فقط به دو مورد که به طور گسترده استفاده می شوند، اشاره می کنیم. در جدول ۲-۲ میزان عدم انطباق ثابت شبکه GaN با چند زیر لایه متداول آورده شده است.

جدول ۲-۲: زیرلایه های متداول برای رشد تری نیترایدها همراه با مقدار درصد عدم انطباق آنها نسبت به GaN [۱]

کریستال	AlN	GaN	Sapphire	6HSiC	ZnO
درصد عدم انطباق شبکه نسبت به GaN	۲/۷-٪	.	(۱۵٪) ۴۹٪	۳/۱-٪	۴٪

Sapphire پرکاربردترین و متداولترین زیرلایه مورد استفاده برای رشد تری نیترایدها است [۲۴،۲۵]. عمده ترین ویژگی این ماده این است که کریستالهای بزرگ و با کیفیت بالا از این بلور با قیمت کم و به آسانی در دسترس می باشد. Sapphire یک بلور شفاف و پایدار در دماهای بالا است که تکنولوژی رشد آن کاملاً، کامل شده است. جهت گیری کریستالی Sapphire و GaN (اگر روی Sapphire و در جهت [۰۰۱] رشد یابد) یکسان می باشد اما سلول واحد GaN به اندازه 30° از محور c نسبت به سلول واحد Sapphire چرخیده است [۲۶،۲۷]. ناهمسانی شبکه بین تری نیترایدها

MBE



شکل ۲-۸: نمایشی از سطح مقطع عرضی یک سیستم رشد بلور MBE

۲-۵-۲-الف- موانع ومشکلات در رشد MBE تری نیترايدها

توسعه و پیشرفت MBE به عنوان یک روش رشد برای تری نیترايدها کند بوده است و علت آن نیز این است که دمای رشد در روش MBE کم است و آمونیم منبع متداول نیتروژن، در دماهای پایین پایدار است. اخیراً مقالات زیادی در رابطه با روش های رشد MBE برای تری نیترايدها منتشر شده است. انگیزه اصلی این کار بهینه کردن سرعت رشد و دمای رشد (تعیین تأثیر منابع مختلف نیتروژن روی کیفیت و آهنگ رشد لایه های رونشستی (epilayer) و تعیین اثر نوع زیرلایه می باشد). [۱۰، ۲۵].

۲-۵-۳- روش رشد رسوب گذاری بخار شیمیایی (MOCVD)

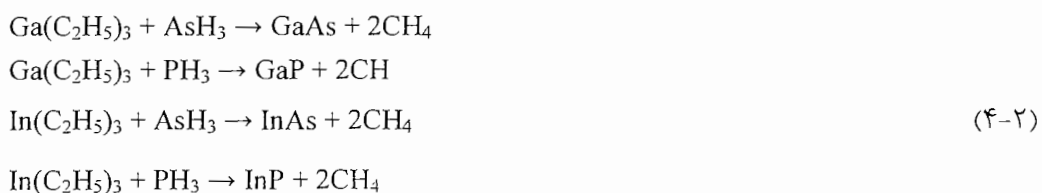
هر چند لایه نشانی در فازهای مختلفی از جمله جامد، مایع و گاز قابل انجام است اما در حالت کلی کنترل فرایند رشد در فاز گازی با کنترل جریان گاز ساده تر است و یک روش مناسب برای رشد نیمه هادیهای ترکیبی، رشد به روش MOCVD می باشد. در این روش هیدراتهای گروه سوم جدول تناوبی با ترکیبات فلزات آلی به روی یک بلور پایه که در دمای حدود 700°C قرار دارد واکنش انجام می دهد. این روش در ساخت قطعاتی نظیر سلولهای خورشیدی و لیزرها نیز مورد استفاده قرار گرفته است. MOCVD در فشار 0.1 تا 0.5 اتمسفر انجام می شود. از این رو تغییر مخلوط گازها به سادگی

انجام یافته و رشد چند لایه نازک را به روی یکدیگر امکان پذیر می سازد. مزیت های این روش که در فشار پایین انجام می شود و به همین دلیل $^{1}\text{Lp-MOCVD}$ نیز نامیده می شود، به صورت زیر است:

در این روش از ترکیبات مختلفی به عنوان مواد شروع کننده می توان استفاده کرد. همچنین برای رشد لایه های کوچکتر از میکرومتر با ترکیبات و ضخامت یکنواخت، مناسب می باشد. عموماً عمل رشد به وسیله مقادیر مشخصی از الکیلهای گروه سوم جدول مثل تری متیل گالیم $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ و تری متیل ایندیم $\text{In}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ و هیدراتهای گروه پنجم مثل AsH_3 و PH_3 در داخل لوله واکنشی از جنس کوارتز انجام می شود. در داخل این لوله بلور پایه روی یک نگهدارنده کربنی قرار داده می شود. گرمای نگهدارنده به وسیله RF تامین می گردد. فرآیند رشد به صورت زیر است:

الف) مولکولهای گاز از داخل لایه مرزی راکد به سطح بلور پایه نفوذ می کنند. در سطح مجاور ویفر که دمای آن حدود 700°C درجه می باشد، آلیک ها و هیدراتها تجزیه شده و بنابراین تولید انواع مختلفی از عناصر گروه سوم و پنجم می کند که به آنها عناصر پایه ای گفته می شود. ب) این عناصر پایه ای در سطح داغ حرکت کرده تا در مکان مناسبی در بلور قرار گیرند و در این زمان رشد صورت می گیرد.

هریک از مراحل بالا می تواند میزان رشد را محدود کند پس میزان رشد به سادگی بوسیله مقدار ورود مواد قابل کنترل می باشد. در یک سیستم آلیاژی چهارتایی GaAsInP در ناحیه ای که گازها با هم مخلوط می شوند واکنشهایی به صورت زیر انجام می شود:



اگر جریان PH_3 را قطع و به جای تری اتیل ایندیم $(\text{In}(\text{C}_2\text{H}_5)_3)$ ، تری اتیل آلومینیم $(\text{Al}(\text{C}_2\text{H}_5)_3)$ را وارد کنیم نیمه هادی AlGaAs که در الکترونیک نوری کاربرد وسیع دارد رشد داده خواهد شد. فن آوری رشد MOCVD به عنوان یک تکنولوژی مهم در تولید تک لایه ها، پیوندهای غیر همگن و ساختارهای چاه کوانتومی با کنترل عالی ضخامت لایه و آلایش مطرح گردیده است. در نهایت بایستی

¹ Low pressure - Metal Organic Chemical Vapor Deposition

خاطر نشان کنیم که روش MBE برای رشد قطعات چاه کوانتومی با کیفیت بالا استفاده می شود. تنها اشکال این روش را می توان در کاربردهای صنعتی دانست زیرا روش بسیار گران قیمتی است و از طرفی سرعت رشد در این روش برای رشد صنعتی مناسب نیست. علاوه بر هزینه ساخت دستگاه، با توجه به صرف انرژی فوق العاده زیاد برای ایجاد خلا بسیار بالا، نمی توان از این سیستم برای تولید صنعتی استفاده کرد. بنابراین روش MBE یک روش کاملاً آزمایشگاهی محسوب می شود و معمولاً در مقیاس های بزرگ و صنعتی از روش اقتصادی تر MOCVD استفاده می گردد [۳۰،۳۱].

- [١] H. Morkoc; *Nitride Semiconductors and Devices*; ed. By R. Hull; R. M. Osgood; Jr. H. Sakaki, and A. Zunger; Springer-Verlage, (1999).
- [٢] B. Gil; *Group III-Nitride Semiconductor Compounds, Physics and Applications*; oxford university press, (1998).
- [٣] J. Dalfors; *Photoluminescence Studids of the electronic Structures in some III-V Quantum Structures*; dissertation No.560, Linkoping University- IFM, (1999).
- [٤] J. Dalfors; *Photoluminescence Studids of the electronic Structures in some III-V Quantum Structures*; dissertation No.560, P. 8, Linkoping University- IFM, (1999).
- [٥] J. W. Orton and C. T. Foxon; *The electron mobility and compensation in n-type GaN; Semicond. Sci. technol.* **13**, 310 (1998).
- [٦] W. C. Johnson; J. P. Parsons; M. C. Crew; *J. Phys. Chem.* **36** , 2651 (1932).
- [٧] R. Juza; H. Hahn and Z. Anorg; *Allg. Chem.* **234**, 282 (1938), **244**, 133 (1940).
- [٨] H. Grimmeiss and Z. H- Koelmans; *Nature (London)* **14a**, 246 (1959).
- [٩] H. P. Maruska, and J. J. Tietje; *Appl. Phys. Lett.* **15**, 327 (1969).
- [١٠] S.C.Jain; M. Willander; J.Narayan; R.Van Overstraeten; *J. Appl. Phys. ReV.* Vol.87, No **3**, 965(2000).
- [١١] P. B. Perry; R. F. Rutz; *Appl. Phys. Lett.* **33** , 319 (1978).
- [١٢] J. H. Harris; R.A. Youngman; *In Properties of Group III Nitrides*; ed. By J. H. Edgar, IEE EMIS Datarev, Series, No.11 (Inspec, London 1994) p.203.
- [١٣] W.M. Yim; E. J. Stofko; P.J. Zanzucchi; J.I. Pankove and S. Gilbert; *J. Appl. Phys.* **44**, 292 (1973).
- [١٤] J. Postnrnak; L. Souckova; *Phys. Status. Solidi* **9** , (1963).
- [١٥] S. Adachi; *J. Appl. Phys.* **53**, 8775 (1982).
- [١٦] H. Amano; T. Takeuchi; S. Sota; H. Sakai; I. Akasaki; ??? Book title???, ed. By F. A. Ponce; T. D. Moustakas; I. Akasaki and B. Monemar; *Mater. Res. Soc. Proc.* **449**, 1143 (1997).
- [١٧] S. Yoshida; S. Misawa; S. Gonda; *J. Appl. Phys.* **53**, 6844 (1982).
- [١٨] D. K. Wickenden; C. B. Bargerion; W. A. Bryden; J. Miragliova; T. J. Kistenmacher; *Appl. Phys. Lett.* **65**, 2024 (1994).
- [١٩] Y. Koide; H. Itoh; M. R. H. Khan; K. Hiramatsu; N. Sawaki; I. Akasaki; *J. Appl. Phys.* **61**, 4540 (1987).
- [٢٠] Akasaki and H. Amano; *Inst. Phys. Conf. Ser.* **142**, 7 (1996).

- [٢١] Lundstrom; *Theoretical and optical investigation of some III-V based quantum wells and modulation doped heterostructures*; dissertation No.489, Linkoping University-IFM, (1996).
- [٢٢] *Low-Dimensional Nitride Semiconductors*; Edited by B. Gil; First published 2002, Oxford Uni. Press.
- [٢٣] B. Monemar; *Phys. Rev. B* **10**, 676 (1974).
- [٢٤] *Group III Nitride Semiconductor Compounds*; edited by B.Gil (Clarendon, Oxford 1998).
- [٢٥] C. R. Abernathy; In *GaN and Related Materials*; edited by S. J. Pearton (Gordon and Breach, New York, 1997 , P. 11-51.
- [٢٦] S.D.Hersee; J.C.Ramer and K.J.Malloy; *MRS Bull.* .July, Vol. **22**, 45 (1997).
- [٢٧] .A.Ponce; *MRS Bull.* **22**, 51 (1997).
- [٢٨] . Singh; *Semiconductor Optoelectronics*;P. 25, Mc Grow-Hill. Inc. (1995).
- [٢٩] S. Nakamura and G. Fasol; *The Blue Laser Diode: GaN Based Light Emitters and Lasers* (Springer-Verlag, Berlin, 1997).
- [٣٠] C. T. Foxon; B. A. Joyce; *Growth of thin films and heterostructures of III-V compounds by molecular beam epitaxy, in Growth and Characterization of Semiconductors*; ed. By R. A. Stradling; P. C. Klipstein (Hilger, Bristol 1990) p. 35.
- [٣١] J. H. Davies; *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors, An Introduction*; Cambridge University Press (1998).

فصل ۳:

فرآیندهای باز ترکیب در نیمه رساناهای نیتروژندار، تکنیک های تجربی و روش آزمایشگاهی

- مقدمه
- اسپکتروسکوپی فوتولومینسانس
- اصول روش فوتولومینسانس وابسته به زمان (TRPL)
- باز ترکیب های نوری در تری نیتراید ها (III-N)
- اکسیتون ها در چاه های کوانتومی

۳-۱- مقدمه

خواص نوری نیمه رساناها در مقایسه با خواص الکتریکی و دیگر ویژگیهای آنها به نسبت خیلی کمتری مورد مطالعه قرار گرفته اند. یکی از دلایل اصلی این مطلب این است که خواص اپتیکی به اندازه خواص الکترونیکی به موارد کاربردی و ساخت وسایل نوری نیمه رسانا منتهی نشده است. البته بایستی لیزرهای نیمه رسانا را از این مورد مستثنی کنیم، زیرا که در حال حاضر، به طور انبوه تولید می شوند و موارد استفاده صنعتی و تجاری آنها در حال افزایش است. اگر بخواهیم فرآیند گسیل نور در یک نیمه هادی را بشناسیم، لازم است که خواص الکترونیکی حامل های بار و پاسخ نوری نیمه رسانا و نحوه بازترکیب حامل های بار را به طور کامل درک کنیم. در این فصل قصد داریم که به اختصار روش آزمایشگاهی به کاربرده شده برای بررسی اپتیکی نمونه های یمان و فرآیندهای بازترکیب مهم در نانوساختارهای نیمه رسانای گروه III-V را مورد بررسی قرار دهیم.

۳-۲- اسپکتروسکوپی فوتولومینسانس (PL)^۱

نور گسیل شده از یک نیمه هادی اطلاعات ارزشمندی را در مورد ساختار الکترونی و دیگر خواص اپتیکی و الکترونیکی ماده فراهم می کند. اصولاً به هر بازترکیب تابشی که از یک تراز الکترونی برانگیخته صورت می گیرد، بجز بازتاب، تابش جسم سیاه و لیزر، لومینسانس گفته می شود [۱]. برای برانگیختگی اپتیکی یک ماده روش های متفاوتی وجود دارد: برانگیختگی با یک منبع نور (فوتولومینسانس)، برانگیختگی با باریکه الکترونی (کاتدولومینسانس) و برانگیختگی با گرما (ترمولومینسانس) و غیره. روش آزمایشگاهی که در این پایان نامه از آن استفاده شده است

^۱ Photoluminescence (PL) spectroscopy

اسپکتروسکوپی فوتولومینسانس (PL) بوده و در ادامه شرح مختصری از سیستم آزمایشگاهی مورد استفاده و اصول اولیه آن آمده است.

۳-۲-۱- معرفی تکنیک فوتولومینسانس :

همانطور که گفته شد اساس روش فوتولومینسانس، مطالعه طیف نور گسیل شده از نمونه ای است که توسط طول موج مناسبی تحریک می شود. فوتولومینسانس به چند دلیل یک تکنیک مشخصه یابیⁱ پرکاربرد در فیزیک نیمه هادی هاست. این روش معمولاً غیر مخرب است و نمونه مورد بررسی در این تکنیک احتیاج به آماده سازی خاصی قبل از اندازه گیری ندارد؛ این روش بسیار حساس و ساده است و اطلاعات دقیقی از ساختار الکترونی نیمه هادی مورد بررسی بدست می دهد. سه تکنیک متفاوت اندازه گیری PL وجود دارد الف) PL معمولی ب) PL جذبیⁱⁱ (PLE) ج) فوتولومینسانس انتخابیⁱⁱⁱ (SPL). در PL معمولی مهمترین شرطی که باید فراهم شود این است که انرژی برانگیختگی بالاتر از انرژی گاف نواری ماده ای که مورد تحریک قرار گرفته است، انتخاب شود. اغلب لیزری با طول موج ثابت استفاده می شود و معمولاً در طیف ثبت شده فرآیندهای بازترکیب قویتر نمایان هستند و فرآیندهای ضعیفتر حذف می شوند. ولی در روش SPL و PLE انرژی برانگیختگی به نحوی انتخاب می شود که هر فرآیند مورد دلخواه ثبت شود و لذا از لیزری با طول موج متغییر استفاده می شود [۲]. ما در این پروژه عمده مطالعات خود را به روش اپتیکی فوتولومینسانس انجام داده ایم ولی برای تکمیل داده های خود و یا در مواردی تایید نتایج حاصله از تکنیکهای دیگر از جمله XRD, TEM^{iv} و TRPL^v کمک گرفته ایم. در یک آزمایش فوتولومینسانس نوعی یک منبع نور، معمولاً یک لیزر، برای تحریک نمونه بکار می رود. این برانگیختگی نوری، با فرستادن الکترون ها از نوار ظرفیت به نوار رسانش موجب تولید زوجهای الکترون و حفره می نماید. با فرض اینکه در نمونه بازترکیب تابشی رخ دهد، وقتی که این زوج های الکترون - حفره با یکدیگر بازترکیب می کنند، انرژی اضافی به صورت گسیل فوتون هایی ظاهر می شود. انرژی فوتون های

ⁱ Characterization

ⁱⁱ PhotoLuminescence Excitation

ⁱⁱⁱ Selective PhotoLuminescence

^{iv} Transmission Electron Microscopy

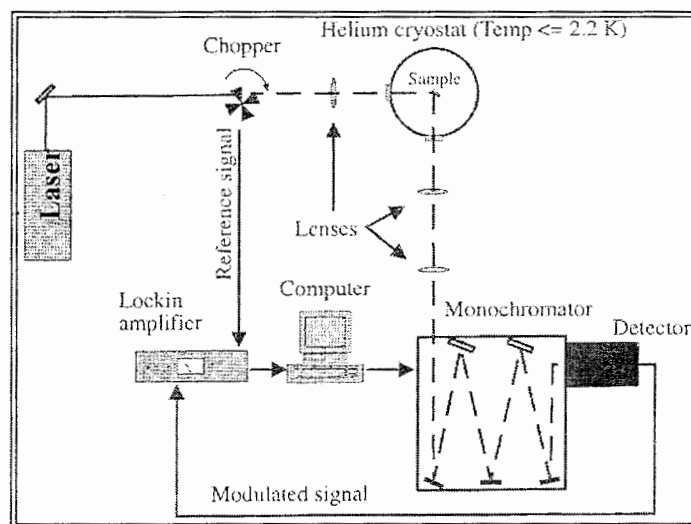
^v Time Resolve Photoluminescence

سطح شده معرف حالت های انرژی حامل ها، در نمونه می باشد و بنابراین اطلاعات مفیدی در مورد حالت های اکسیتونی، گاف نواری، مقدار و نوع نقایص و ناخالصی ها و انرژی محدودیت و اثر احتمالی میدان های خارجی $\vec{E}, \vec{B}$ و ... را بدست می دهد. نور یا لومینسانس سطح شده از نمونه جمع آوری شده و شدت بر حسب تابعی از انرژی فوتون گسیلی ثبت می شود تا تولید یک طیف PL کند، و بدین ترتیب با تحلیل طیف PL بدست آمده به اطلاعاتی که در بالا اشاره شد دست پیدا می کنیم. طول موج لیزر در آزمایش PL معمولی همانطوری که اشاره شد پارامتر خیلی مهمی نیست و اغلب یک لیزر با طول موج گسیلی ثابت استفاده می شود و اینکه آیا انرژی فوتون برانگیزنده بایستی بالاتر یا پایین تر از انرژی گاف نواری ماده مورد بررسی باشد بستگی به چند پارامتر دارد در چاه های کوانتومی، انرژی لیزر تحریک کننده بعضی اوقات بالاتر از انرژی گاف نواری ماده تشکیل دهنده سد انتخاب می شود و گاهی پایین تر از انرژی گاف نواری سد ولی بیشتر از انرژی گاف نواری چاه. فاکتورهایی که در این انتخاب دخیل هستند عبارتند از :

- در دسترس بودن منبع تحریک کننده نمونه یعنی لیزرها یا لامپ ها.
- میزان بازدهی تولید حامل در طول موجی که فوتون تحریک کننده دارد.
- عمق نفوذ نور تحریک کننده که با ضریب جذب ماده رابطه مستقیم دارد. ما معمولاً می خواهیم لایه رانشینی شده (ناحیه فعال شامل QW ها) را تحریک کنیم و لومینسانس حاصل از آن را تحلیل کنیم و نه لومینسانس حاصل از زیر لایه را، لذا طول موج بایستی طوری انتخاب شود که عمق نفوذ در نظر گرفته شود.
- مکان تولید حامل ها در نمونه. در بعضی از موارد ما فقط می خواهیم که در درون چاه حامل ها را تولید کنیم لذا انرژی فوتون تحریک کننده را پایین تر از انرژی گاف نواری سد و بالاتر از انرژی گاف نواری ماده ای که چاه از آن ساخته شده است، انتخاب می کنیم. در مورد خاص آزمایشات فوتولومینسانس روی چاه های کوانتومی بررسی شده در این پایان نامه انرژی فوتون تحریک کننده بالاتر از انرژی گاف نواری چاه و پایینتر از انرژی گاف نواری سد انتخاب شده است.

باز ترکیب جفت های الکترون- حفره به طرق مختلف می تواند رخ دهد و هر کدام از این باز ترکیب ها قله مخصوص به خود (که بعضی از آنها ضعیف و بعضی شدید هستند) در طیف فوتولومینسانس دارند.

در مورد نمونه های خودمان که پنج چاه کوانتومی متناوب (MQWs) از $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ می باشد، در محدوده دماهای پایین، غالبترین پیک ناشی از اکسیتون های جایگزیده می باشد و اصولاً تشخیص پیک های ضعیفتر در روش PL مشکل است چون پیک ناشی از آنها در زیر پیک های قویتر گم می شوند؛ اما در روش فوتولومینسانس جذبی (PLE) چون سیستم را برای آشکارسازی یک طول موج خاص تنظیم می کنیم و یک لیزر با گستره ای از طول موجهای تابشی را به نمونه می تابانیم لذا هر فرآیندی، حتی بازترکیب های ضعیف را می توان آشکارسازی کرد. در شکل ۱-۳ طرح شماتیک یک سیستم فوتولومینسانس نشان داده شده است.



شکل ۱-۳: طرح شماتیکی از آزمایش فوتولومینسانس معمولی [۳]

این سیستم ۴ قسمت اصلی دارد:

- یک منبع نور تحریک کننده
- کرایستاتⁱ
- تکفام سازⁱⁱ
- آشکارساز

در ضمن یک سیستم تحلیل گر مثل کامپیوتر نیز وجود دارد که اطلاعات در آن ذخیره می شود و همچنین تک رنگ کننده و طول موج لیزر برای برانگیختگی کنترل می شود. همانطور که اشاره شد،

ⁱ Cryostat

ⁱⁱ monochromator

منبع تحریک کننده معمولاً یک لیزر است که یک منبع پایدار، تکفام و با شدت بالا می باشد. لیزرهای مختلفی چون لیزر هلیم - کادمیم (HeCd)، Nd-Vanadate، هلیم نئون (HeNe)، لیزر آرگون (Ar) و Ti-Sapphire معمولاً برای این منظور بکار گرفته می شوند. کرایستات حاوی هلیم مایع و برای سرد کردن نمونه تا دماهای پایین بکار می رود و دارای دمای قابل تنظیم می باشد. آزمایش روی نمونه ها در دماهای پایین پیک های فوتولومینسانس تیزتر و بهتری را به وجود می آورد و بازدهی بیشتر لومینسانس را موجب می شود و به این دلیل داشتن محفظه ای که دمای پایین را در آزمایش های فوتولومینسانس ایجاد کند برای ما از اهمیت بالایی برخوردار می باشد. فوتولومینسانس حاصل از نمونه در دماهای بالا به خاطر برهم کنش قوی بین الکترون ها و نوسانات شبکه (فونونهای گرمایی) در نیمه هادیها پهن و گسترده می باشد و اطلاعات مفیدی از آن نمی توان استخراج کرد. در دماهای بالا باز ترکیب های غیرتابشی موثرتر و بیشتر هستند و بنابراین شدت لومینسانس را کاهش می دهند. در قسمت بعد در مورد کرایستات و نحوه عملکرد آن توضیح می دهیم. تکفام ساز طول موج مورد نظر را انتخاب می کند یعنی طول موج لومینسانسی که به آشکارساز در خروجی تکفام ساز خواهد رسید. طیف PL با جاروب طول موج آشکارسازی و تبدیل سیگنال لومینسانس به سیگنال الکتریکی توسط آشکارساز حاصل می گردد.

در مورد نمونه های مورد بررسی در این پایان نامه برای تحریک از هارمونیک چهارم لیزر پیوسته Nd: Vanadate با طول موج گسیلی ۲۶۶ nm و هارمونیک سوم لیزر Ti-Sapphire استفاده شده است. نور لیزر توسط مجموعه ای از عدسی ها بر روی نمونه متمرکز می گردد. نمونه در کرایستات با دمای قابل تنظیم در محدوده ۲K تا ۳۰۰K قرار می گیرد. سیگنال فوتولومینسانس توسط یک تکفام ساز پراشیده شده و سیگنال های منتخب در شکاف خروجی تکفام ساز توسط یک آشکارساز UV (دوربین CCD^۱ در آزمایشهای PL) که با استفاده از نیتروژن مایع خنک می گردد تا سیگنال های نویز به حداقل برسد، و توسط سینکرو اسکن هاماماتسو (در آزمایشهای TRPL) آشکارسازی می شود [۳،۴].

^۱ Charge Coupled Device

۳-۲-۱- الف - آشکارساز CCD

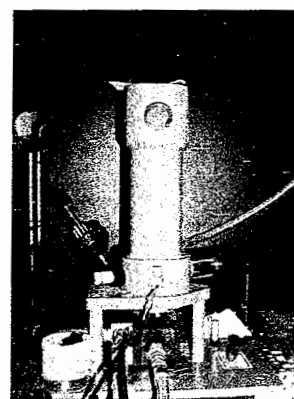
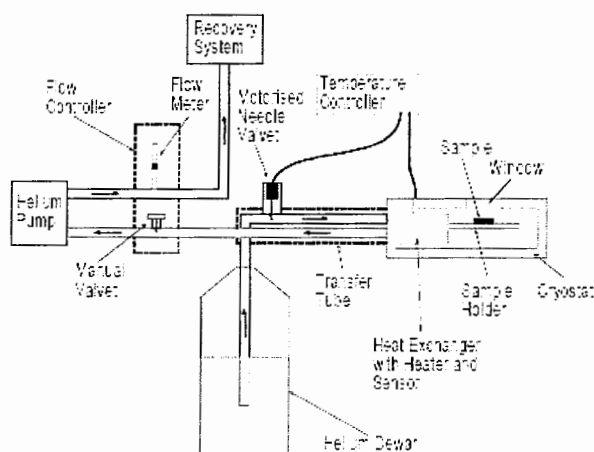
آشکارسازی که در این پروژه در آزمایشات PL استفاده شده است، یک دوربین CCD می باشد که با نیتروژن مایع خنک می شود. این آشکارساز از یک ماتریس دو بعدی 800×2000 پیکسل ساخته شده است که هر پیکسل یک دیود نوری سیلیکون است. هر پیکسل مربعی به ضلع $15 \mu m$ می باشد و کل مساحت سطح حساس $360 mm^2$ می باشد. فوتون ها بنابر اثر فوتوالکتریک، بارهای مقیدی را که توسط نزدیکترین پیکسل به دام افتاده اند را آزاد می کنند و بارهای پیکسل های مجاور توسط الکترودهای گیت در جلوی آشکارساز از یکدیگر جدا می شوند. یک شاتر در جلوی تکفام ساز زمان نوردهی آشکارساز را تعیین می کند. بعد از نوردهی، بارها به داخل یک بازخوان^۱ شیفتر پیدا می کنند. سیگنال ضعیف حاصل از بازخوان تقویت و دیجیتالی می شود و در حافظه کامپیوتر ذخیره می شود. تبدیل سیگنال آنالوگ به دیجیتالی با دقت ۱۶ بیت انجام می شود. و بنابراین ماکزیمم تعداد شمارش ثبت شده $1-2^{16}$ (یعنی ۶۵۵۳۵) خواهد بود. همانطور که ذکر شد این نوع آشکارسازها از کم نویزترین آشکارسازها می باشند [۴،۵].

۳-۲-۱- ب - کرایستات

همان طوری که پیشتر اشاره شد کرایستات محفظه ای است که نمونه برای اندازه گیری در دماهای پایین در آن قرار می گیرد و برای پایین آوردن دمای نمونه بکار می رود. برخی از کرایستات ها با نیتروژن مایع و برخی با هلیوم مایع (کمتر از ۲K) سرد می شوند و برخی نیز بصورت سیستم بسته کار می کنند. در اینجا طرز کار یک نمونه از کرایستات با جریان گاز هلیوم که در سیستم اندازه گیری فوتولومینسانس بکار گرفته شده است را به اختصار توضیح می دهیم. این کرایستات دارای پنجره ای است که نمونه را می توان توسط یک سری اهرم ها به نزدیکی این پنجره آورد و از نمونه در هر دمای دلخواهی عکسبرداری کرد. کرایستات روی قطعه ای که در جهت محورهای X,Y,Z با دقت در حدود میکرومتر قابلیت حرکت دارد، قرار دارد و بدین ترتیب نمونه را با دقت زیادی می توان در مقابل میکروسکوپ تنظیم کرد. در اتاقک نمونه خلاء ایجاد شده و نمونه توسط نگهدارنده نمونه که به یک تغییر دهنده دما متصل است، خنک می شود. از یک پمپ پخشی یا توربو مولکولار استفاده می شود تا

^۱ Read out register

فشار درون محفظه به حدود 10^{-5} - 10^{-4} mbar برسد. هلیوم مایع توسط یک لوله ایزوله خلاء شده از محفظه بیرونی به داخل تغییر دهنده دما پمپ می شود. یک گرم کنندهⁱ الکتریکی روی میزان کننده دما نصب شده است و همراه آن یک مقاومت آهنی rhodium قرار دارد که به عنوان یک سنسور دما عمل می کند. در ضمن یک تنظیم کننده دما به شیر، گرم کننده و سنسور متصل می باشد که به طور اتوماتیک شار هلیوم و گرمادهی را در هر دمایی کنترل می کند [۴].



شکل ۳-۲: شکل شماتیک یک کریستات و سیستم خنک کننده که در آزمایشهای PL استفاده شده است. در سمت راست یک نمونه واقعی از آن که با هلیوم مایع کار می کند نشان داده شده است [۴].

۳-۳- اصول روش فوتولومینسانس وابسته به زمان (TRPL)ⁱⁱ

مطالعه دینامیکی فرآیندهای بازترکیبی توسط تکنیک فوتولومینسانس وابسته به زمان، اطلاعات بسیار مفیدی راجع به نوع بازترکیبات و طول عمر آنها به ما می دهد که کمک موثری در درک فیزیک این فرآیندهاست. استخراج اطلاعات مورد نیاز از اندازه گیری های متعددی که در شرایط متفاوت بر روی نمونه ها به انجام رسیده است، امکان مطالعه پارامترهای مختلف از جمله اثر دما، آلایش و میدان های پلاریزاسیون را امکان پذیر می سازد. روش های مطالعه زمانی بازترکیب های نوری دارای تنوع زیادی است. در بخشی از این پایان نامه به مطالعه دینامیک بازترکیب های نوری در ساختارهای

ⁱ Heater

ⁱⁱ Time resolved photoluminescence

ناهمگون GaN/AlGaN می پردازیم. دو پیکربندی متمایز برای انجام این آزمایش وجود دارد. پیکربندی مطالعه زمانی فوتولومینسانس بوسیله سیستم Streak camera نسبت به روش Time correlated photon counting دارای دقت و سرعت بیشتری می باشد [۲].

۳-۳-۱- سیستم Streak camera

Streak camera یک آشکارساز نوری فوق العاده پرسرعت است که قابلیت آشکارسازی پدیده هایی با فاصله زمانی در حدود پیکوثانیه را دارد. پرتو تابشی توسط یک عدسی روی روزنه ورودی متمرکز می شود، که در پشت این روزنه فوتوکاتد Streak camera قرار دارد. فوتو کاتد به منظور تبدیل فوتون های ورودی به الکترون بکار می رود. در مرحله بعدی الکترون ها توسط یک میدان الکترواستاتیک شتاب می گیرند. در نهایت این الکترون های شتابدار بوسیله یک میدان اعمالی منحرف می شوند. میدان منحرف کننده عمود بر جهت روزنه اولیه اعمال می گردد. جدایی محل برخورد الکترون ها با صفحه فسفر نشان دهنده جدایی فوتون هاست و شدت نور ورودی نیز با شدت موضعی ثبت شده در تصویر حاصل از برخورد الکترون ها با صفحه فسفر متناسب است. با ترکیب آشکارسازهایی مشابه Streak camera با تکفام ساز می توان به اطلاعات جالبی در هر طول موج دست یافت. آشکار سازی زمانی طیف بوسیله این پیکربندی دارای سرعت، دقت و کیفیت بالایی است. وضوح زمانی آن نیز کمتر از ۶۰۰ پیکوثانیه است. از معایب این آشکار ساز، نیاز به سیگنال قوی فوتولومینسانس را می توان نام برد [۳].

۳-۴- باز ترکیب های نوری در تری نیتراید ها (III-N)

در این بخش به طور خلاصه فرایندهای باز ترکیب تابشی را که در نیمه هادی های با گاف نواری مستقیم روی می دهند را معرفی می کنیم و از آنها در فصول بعدی استفاده می کنیم. فرایندهای باز ترکیب در مواد با گاف نواری غیر مستقیم در این فصل بحث نشده است؛ چون تمامی نمونه هایی که در این پایان نامه بررسی شده اند دارای گاف نواری مستقیم هستند. همانطور که می دانیم باز ترکیب حامل ها در ماده به دو صورت مختلف شکل می گیرد: الف) باز ترکیب تابشی ب) باز ترکیب

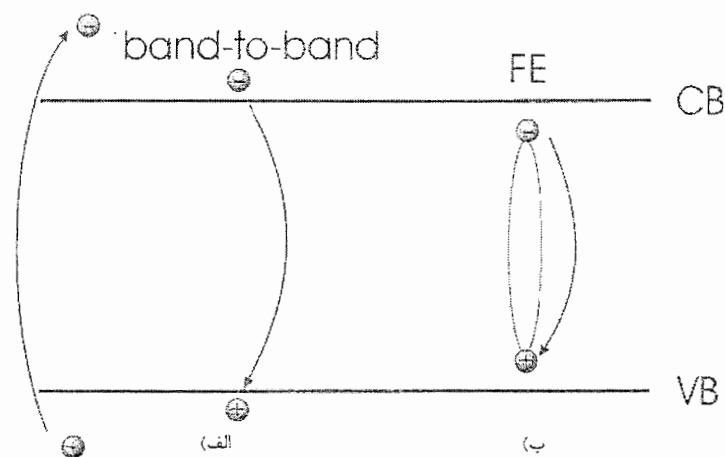
غیرتابشی چون در آزمایش های PL با فرایند بازترکیب غیرتابشی خیلی کم سر و کار داریم لذا این دسته به طور خلاصه بحث شده است. برای اینکه فرایندهای بازترکیب تابشی را در جمعیت غیر تعادلی الکترون های یک نیمه هادی مشاهده کنیم، لازم است که ابتدا یک سری از منابع برانگیختگی در اختیار داشته باشیم. همانطوری که قبلاً گفته شد می توان با تابش فوتون ها یا الکترون ها یا تزریق حامل ها در محل یک پیوند، الکترون ها را در یک نیمه هادی برانگیخته کرد. گسیل تابشی بدست آمده به ترتیب فوتولومینسانس، کاتدولومینسانس و الکترولومینسانس نامیده می شود. وقتی که با تحریک یک الکترون از نوار ظرفیت به نوار هدایت فرستاده می شود جای خالی الکترون به وجود آمده حفره نامیده می شود و اثر جمعی الکترون های باقیمانده در نوار ظرفیت بر روی این حفره به صورت یک بار مثبت (+e) و جرم موثر مثبت نمایان می شود [۶]؛ بدین ترتیب برانگیختگی با انرژی بالاتر از انرژی گاف نواری در نیمه هادی تولید یک جفت الکترون و حفره می کند. فرایندهای بازترکیب تابشی که در یک نیمه هادی اتفاق می افتد با توجه به این نکته که آیا ناخالصی در بلور وجود دارد یا نه به دو دسته فرایندهای ذاتیⁱ و غیر ذاتیⁱⁱ دسته بندی می شوند. فرایندهای بازترکیب تابشی که در یک نیمه هادی کامل اتفاق می افتند به فرایندهای ذاتی موسوم هستند و به فرایندهایی که به علت حضور ناخالصی ها در بلور اتفاق می افتند، فرایندهای غیرذاتی گفته می شود. در شکل ۳-۳ طرح شماتیک دو گذار تابشی ذاتی، یعنی بازترکیب نوار به نوارⁱⁱⁱ و بازترکیب اکسیتون آزاد^{iv} (FE) نشان داده شده است. همچنین چند نمونه از فرایندهای بازترکیب تابشی غیر ذاتی در شکل ۴-۳ نشان داده شده است. فرایند بازترکیب نوار به نوار در دماهای پایین در ساختارهایی که از GaN ساخته شده اند معمولاً کمتر دیده می شود و بازترکیب های مربوط به اکسیتون ها در این دماها نقش غالبتری دارند [۵].

ⁱ Intrinsic

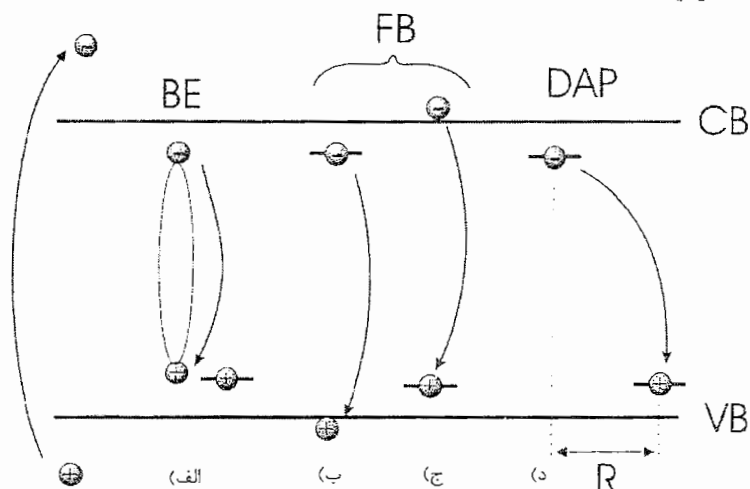
ⁱⁱ Extrinsic

ⁱⁱⁱ Band to band recombination

^{iv} Free exciton recombination



شکل ۳-۳: طرح شماتیک دو گذار تابشی ذاتی (الف) بازترکیب نوار به نوار و (ب) بازترکیب اکسیژون آزاد در یک چاه کوانتومی GaN/AIGaN [۳]

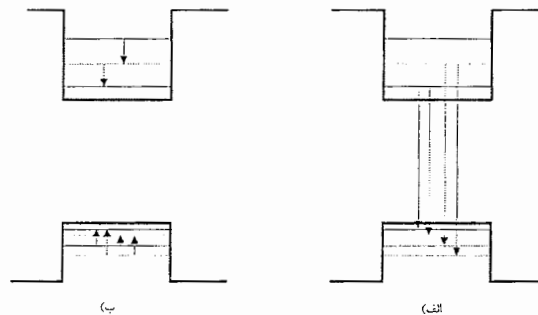


شکل ۴-۳: طرح شماتیک چند نمونه از فرآیندهای بازترکیب تابشی غیرذاتی در چاه های کوانتومی GaN/AIGaN (الف) اکسیژون مقید شده (در اینجا اکسیژون مقید شده به پذیرنده ها) (ب) و (ج) بازترکیب حامل آزاد- حامل مقید (د) بازترکیب جفت دهنده و پذیرنده [۳]

۳-۴-۱- بازترکیب نوار به نوار

بازترکیبی که بین یک الکترون در نوار هدایت (C.B.) و یک حفره در نوار ظرفیت (V.B.) اتفاق می افتد بازترکیب نوار به نوار نامیده می شود (شکل ۳-۳ را ملاحظه کنید). بایستی توجه کنیم که بین گذارهایی که بین دو نوار ظرفیت و هدایت در یک QW اتفاق می افتد با گذارهایی که بین زیر ترازهای یک نوار (هدایت یا ظرفیت) به تنهایی اتفاق می افتد، تمایز قائل شویم. شکل ۳-۵ این تمایز را نشان می دهد. در تقریب چاه نامتناهی گذارهایی که بین نوارها اتفاق می افتد از قانون

انتخاب [۷]، $\Delta n = 0, \Delta m_j = 0, \pm 1$ ، پیروی می کنند. همین گذارهای مختلف باعث به وجود آمدن قطبش های مختلفی در فوتون ساطع شده می شوند [۸].



شکل ۳-۵: الف) گذارهایی که بین دو نوار ظرفیت و هدایت و ب) گذارهایی که بین زیرترازهای یک نوار (هدایت یا ظرفیت) در یک QW اتفاق می افتد [۳].

۳-۴-۲- باز ترکیب اکسیتون آزاد

الکترون و حفره ای که توسط برانگیختگی (تحریک) تولید شده اند به علت جاذبه کولنی بینشان می توانند یک حالت مقید ایجاد کنند. این حالت مقید به عنوان یک ماهیت جدید یا شبه ذره می تواند در نظر گرفته شود و به آن اکسیتون آزاد گفته می شود. اکسیتونها مشابه اتمهای پوزیترونیم هستند که در آنها یک الکترون توسط برهمکنش کولنی به یک پوزیترون پیوند خورده است. در اکسیتونها الکترون به حفره پیوند خورده و شبه ذره حاصل از لحاظ الکتریکی خنثی است. معمولاً اکسیتونها را در دو حالت حدی گوناگون مورد بحث قرار می دهند: الف) تقریب فرنکلⁱ که در آن اکسیتون کوچک و قویاً مقید است ب) تقریب مات و وانیرⁱⁱ که در آن اکسیتون به طور ضعیف مقید و فاصله الکترون و حفره در مقایسه با ثابت شبکه بزرگ است و تابع موج الکترون و حفره بر روی نقاط شبکه زیادی پخش شده است [۶]. در اکسیتون قویاً مقید برانگیختگی به طور موضعی بر روی یک اتم یا نزدیک آن قرار دارد و معمولاً حفره بر روی همان اتمی است که الکترون قرار دارد ولی زوج الکترون - حفره در هر جایی در بلور قرار می گیرند. در جامدات با بستگی بین اتمی ضعیف، مواد یونی مثل هالیدهای قلیایی، اکسیتون ها از نوع اکسیتون فرنکل هستند در حالیکه در مواد با بستگی بین اتمی قویتر مانند نیمه هادی ها، اکسیتون ها از نوع وانیر هستند [۹، ۱۰، ۱۱]. در شکل ۳-۶ شکل

ⁱ Frenkel

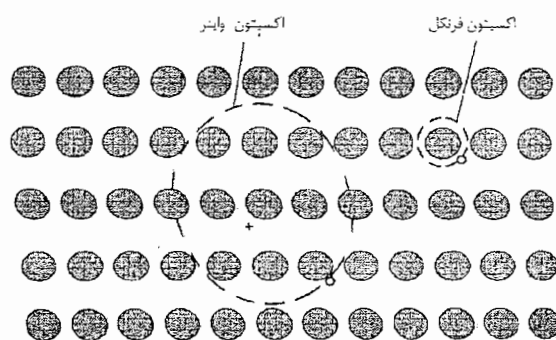
ⁱⁱ Wannier

شماتیک یک اکسیژن فرنکل و یک اکسیژن وانیر نشان داده شده است. چون موادی که در این تر بررسی شده اند چاه های کوانتومی نیمه هادی هستند لذا بحث خود را در ادامه به اکسیژن های مات و وانیر محدود می کنیم. این اکسیژن ها دارای تحرک پذیری زیاد و انرژی بستگی کم هستند این اکسیژن ها چون به راحتی در شبکه حرکت می کنند به آن اکسیژن آزاد گفته می شود. در طیف فوتولومینسانس حاصل از مواد مورد بررسی پیک مربوط باز ترکیب اکسیژن آزاد به اندازه انرژی بستگی اکسیژن E_n ، نسبت به انرژی گاف نواری پایینتر است. در ساده ترین تقریب و با فرض اینکه اکسیژن را یک مسأله دو جسمی فرض کنیم، یعنی یک الکترون با بار منفی و یک حفره با بار مثبت، به مدلی شبیه به مدل اتم هیدروژن دست خواهیم یافت. با بکار بردن تقریب جرم موثر^۱ (EMA)، برای این مدل هیدروژن گونه انرژی حالت های مقید مجزا از هم توسط رابطه زیر داده می شود [۳]

$$E_n = \frac{\mu^*}{m_0} \frac{1}{\epsilon_r^2} \frac{1}{n^2} R_H \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1-3)$$

$$\frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \quad (2-3)$$

که R_H ثابت ریدبرگ (13.6 eV) و μ^* جرم موثر کاهش یافته اکسیژن و ϵ_r ثابت دی الکتریک استاتیکی نسبی ماده است. در یک QW مقدار E_n با مقداری که از رابطه فوق بدست می آید کمی متفاوت خواهد بود. در یک QW بخاطر وجود اثر محدودیت، انرژی بستگی اکسیژن افزایش می یابد و این یعنی اینکه الکترون و حفره به یکدیگر نزدیکتر می شوند و در نتیجه برهمکنش کولنی بین آنها افزایش می یابد.



شکل ۳-۶: شکل شماتیک یک اکسیژن فرنکل و یک اکسیژن موت - وانیر

^۱ Effective mass approximation

آقای ماتیوⁱ و همکارانش یک روش تحلیلی نسبتاً ساده را برای محاسبه انرژی بستگی اکسیتون ها در داخل چاه کوانتومی بکار بردند [۱۲] و به مقدار زیر دست پیدا کردند.

$$E_n = \frac{\mu^*}{m_0} \frac{1}{\varepsilon_r^2} \frac{1}{\left(n + \frac{\alpha - 3}{2}\right)^2} R_H \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3-3)$$

که در رابطه فوق α ، بعد فضا، درجه ناهمسانگردیⁱⁱ به وجود آمده در چاه کوانتومی را بیان می کند. در یک چاه کوانتومی نوعی α بین ۲-۳ متغیر است و عدد ۲ مربوط به حالت دوبعدی کامل است. با توجه به رابطه های بالا انرژی بستگی اکسیتون در QW حدود چهار برابر بزرگتر از انرژی بستگی اکسیتون در نیمه رسانای کپه ای از همان جنس می باشد. به عنوان مثال انرژی بستگی اکسیتون در نیمه هادی $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ در حدود ۳ meV است [۱۳] در حالیکه انرژی بستگی اکسیتون برای فیلم های کوانتومی با پهنای 50°A از جنس $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ در حدود ۱۰ meV می باشد و برای سیمهای کوانتومی با ابعاد $50^\circ \text{A} \times 50^\circ \text{A}$ این مقدار به ۱۸ meV می رسد [۱۴]. البته همانطوری که قبلاً اشاره شد بازترکیب اکسیتونی در دماهای پایین و در چگالی حامل های پایین نسبت به بازترکیب نوار به نوار غالبتر است و بازترکیب نوار به نوار در دماهای بالا و چگالی حامل های بالا که توسط توان برانگیختگی نوری بالا و آرایش ایجاد می شود، غالب می گردد.

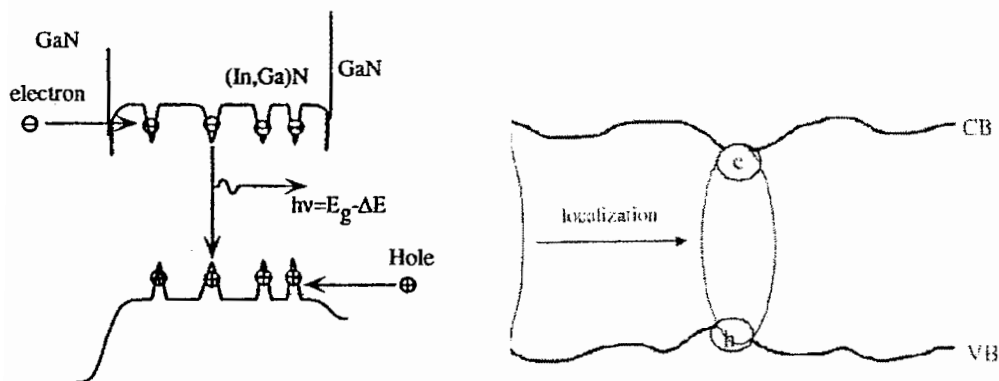
۳-۴-۳- اکسیتون های جایگزیدهⁱⁱⁱ

اکسیتون ها می توانند در حالت های جایگزیده ای که معمولاً به علت افت و خیزهای پتانسیل موجود در سطح مشترک ساختارهای ناهمگون در فضای حقیقی وجود دارند، به دام بیافتند و جایگزیده شوند و سپس بازترکیب تابشی کنند و به این دلیل این بازترکیب ها، بازترکیب اکسیتون جایگزیده نامیده می شود [۱۵]. ساختارهای ناهمگون گروه تری نیترایدها حتی اگر با کیفیت خیلی بالا تولید شوند دارای اغتشاشات پتانسیل می باشند. منشأ این اغتشاشات پتانسیل ناخالصی ها و افت و خیزهای سطح نمونه و دررفتگی ها می باشد. در شکل ۳-۷ جایگزیدگی اکسیتون ها به طور شماتیک نشان داده شده است.

ⁱ H. Mathieu

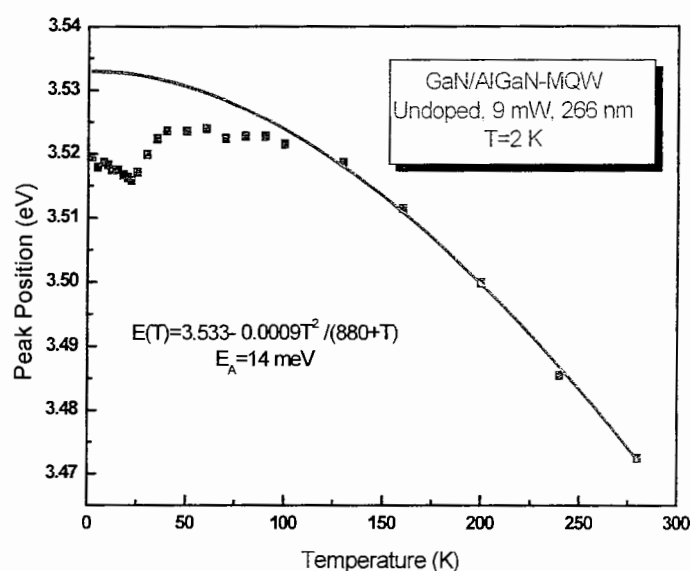
ⁱⁱ Anisotropy

ⁱⁱⁱ Localized exciton



شکل ۳-۷: طرحواره ای از جایگزیدگی اکسیتون ها در افت وخیزهای پتانسیل ناشی از ناهمواي سطح [۵،۱۶]

همانطور که می دانیم، شعاع بوهلر اکسیتون در تری نیترايدها از نیمه هادی های دیگر خیلی کمتر است (شعاع بوهلر اکسیتون در GaN، 28 meV است در حالیکه به طور مثال در GaAs، 130 meV است) و همین موضوع باعث می شود که این اکسیتون های کوچک در داخل افت و خیزهای پتانسیل به تله بیفتند و جایگزیده شوند. برای اینکه انرژی جایگزیدگی اکسیتون های جایگزیده محاسبه شوند، معمولاً وابستگی دمایی فوتولومینسانس حاصل از این نمونه ها مورد بررسی قرار می گیرند. در شکل ۳-۸ وابستگی دمایی پیک PL حاصل از یک چاه کوانتومی چندگانه GaN/AlGaIn بدون آلايش نشان داده شده است و انرژی بستگی برای نمونه بدون آلايش حدود 14 meV بدست آمده است. وقتی که دما افزایش پیدا می کند، همانطوری که گاف نواری با افزایش دما کاهش می یابد پیک PL حاصل از نمونه ها نیز شیفتي به سمت انرژی های کم خواهد داشت. در فصل ۶ این موضوع به طور کامل بحث خواهد شد.



شکل ۳-۸: نمودار وابستگی دمایی طیف PL حاصل از چاه کوانتومی چندگانه GaN/AlGaIn بدون آلودگی در دمای ۲ K

۳-۴-۴- باز ترکیب حامل آزاد - حامل مقیدⁱ

در محدوده دماهای پایین چون انرژی گرمایی لازم برای یونیزه کردن حامل ها در دسترس نیست، حامل ها در مراکز ناخالصی منجمدⁱⁱ می شوند. در آزمایش PL الکترون های آزادی که در نوار هدایت وجود دارند می توانند با حفره های منجمد شده در محل پذیرنده ها باز ترکیب تابشی انجام دهند و لذا انرژی فوتون ساطع شده در اثر این باز ترکیب، اختلاف بین انرژی نوار رسانش و انرژی تراز پذیرنده ها می باشد (یعنی تفاضل بین انرژی گاف نواری و انرژی بستگی پذیرنده ها $(E_g - E_A)$). به طور کلی یک الکترون (حفره) مقید به دهنده (پذیرنده) می تواند با یک حفره (الکترون) در نوار ظرفیت (هدایت) باز ترکیب کند و به چنین باز ترکیبی، باز ترکیب حامل آزاد - حامل مقید گفته می شود (به شکل ۳-۴ توجه کنید). اگر چگالی پذیرنده ها (دهنده ها) را افزایش دهیم، پذیرنده ها (دهنده ها) به یکدیگر خیلی نزدیکتر شده و تابع موج آنها همپوشانی می کنند و تشکیل نواری بنام نوار ناخالصی می دهند. اگر چگالی ناخالصی را خیلی افزایش دهیم در این صورت نوار ناخالصی پهنتر شده به طوریکه با نزدیکترین نوار (نوار هدایت در مورد دهنده ها و نوار ظرفیت در مورد پذیرنده ها) همپوشانی کرده و در نتیجه حامل ها آزاد خواهند شد. این اثر بنام گذار ماتⁱⁱⁱ معروف می باشد.

ⁱ Free-to-bound (FB) recombination

ⁱⁱ Freeze

ⁱⁱⁱ Mott transition

۳-۴-۵- باز ترکیب های غیر تابشیⁱ

الکترون های تحریک شده ممکن است که باز ترکیب غیرنوری نیز انجام دهند. که در آن صورت انرژی اضافی به طرق دیگری غیر از گسیل فوتون (نور) آزاد خواهد شد. برای مثال حاصل باز ترکیب، یک یا چند فونون خواهد بود و یا انرژی اضافی به یک الکترون داده خواهد شد (که البته این فرآیند، فرآیند اوزهⁱⁱ نامیده می شود). نهایتاً همه گذارهای غیرتابشی به صورت تولید گرما در نمونه خود را نشان می دهند.

۳-۵- اکسیتون ها در چاه های کوانتومی

تعداد اکسیتون های آزاد (FE) در چاه های کوانتومی نیمه رسانا در مقایسه با نیمه رسانای کپه ای از همان جنس بیشتر می باشد و بنابراین در طیف اپتیکی مشاهده شده نقش غالب را دارند. این موضوع ناشی از افزایش انرژی بستگی اکسیتون بخاطر اثر محدودیت می باشد که این امکان را فراهم می کند تا باز ترکیب اکسیتون های آزاد را حتی در دمای اتاق مشاهده کنیم [۱۷]. این اثر به افزایش همپوشانی توابع موج الکترون و حفره (و بنابراین برهم کنش کولنی بیشتر) در اثر عامل محدودیت مرتبط می شود. در حالتی که با سیستمی دو بعدی مواجه هستیم انرژی بستگی اکسیتون با فاکتور ۴ افزایش می یابد. قدرت یک فرآیند باز ترکیب توسط پارامتری به نام قدرت نوسانگرⁱⁱⁱ محاسبه می شود که روشی برای بیان کردن احتمال آن باز ترکیب می باشد. چون تابع موج FE از حالت های بلوخ الکترون و حفره ساخته شده است، احتمال پیدا کردن یک الکترون در هر نقطه شبکه خاص متناسب با حجم سلول واحد (در سه بعد a^3) می باشد. احتمال برای حفره کوپل شده در سلول واحد مشابه، متناسب با معکوس حجم اکسیتون یعنی a_{exc}^{-3} می باشد؛ و این دو با همدیگر به نسبت $(\frac{a}{a_{exc}})^2$ برای احتمال تشکیل اکسیتون می شود [۱۸] برای GaAs کپه ای با طول ثابت شبکه $a = 5/6^\circ \text{A}$ و شعاع بوهر اکسیتونی $r_B = 140^\circ \text{A}$ ، قدرت نوسانگر حدود $f = 1 \times 10^{-4}$ خواهد شد. بحثی مشابه بحث بالا که برای حالت دوبعدی انجام شد، منجر به نسبت مربعی $(\frac{a}{a_{exc}})^2$ برای تشکیل اکسیتون در دوبعد

ⁱ Nonradiative recombination

ⁱⁱ Auger process

ⁱⁱⁱ Oscillator strength

شده است. این بدین معنی است که نسبت قدرت نوسانگر اکسیتون بین دو بعد و سه بعد بایستی از رابطه زیر محاسبه شود:

$$\frac{f_{2D}}{f_{3D}} = \frac{1}{a} \left[\frac{(a_{exc}^{3D})^3}{(a_{exc}^{2D})^2} \right] \quad (4-3)$$

برای GaAs، با $a_{exc}^{3D} = 140^\circ \text{\AA}$ و $a_{exc}^{2D} = 70^\circ \text{\AA}$ ، مقدار این نسبت برابر ۱۰۰ خواهد شد. حتی یک چنین تقریب خام و ناکاملی مبین قدرت نسبی گذارهای دوبعدی می باشد؛ و به وضوح مشخص است که ابعاد نمونه مورد بررسی نقش بسیار مهمی در غالب کردن فرآیند اکسیتونی در بازترکیب هایی که در نمونه رخ می دهند دارد. قدرت بازترکیب اکسیتون های مقید (BE) در GaAs کپه ای از تناسب بین چگالی حالت های FE ها و تعداد جایگاه های ناخالصی پیروی نمی کند. قدرت گذار BE از رابطه زیر بدست می آید:

$$f_{BE} = \left[\frac{a_{exc}}{a} \right]^3 f_{FB} \quad (5-3)$$

f_{BE} برای GaAs، از مرتبه واحد می باشد یعنی ۴ مرتبه بزرگتر از قدرت گذار FE های متناظر می باشد. این بیان غیر متعارف می تواند این گونه تعبیر شود که به خاطر حضور ناخالصی ها توابع موج حامل ها جایگزیده می شود و همپوشانی بین آنها افزایش پیدا می کند و در نتیجه قدرت نوسانی BE ها افزایش پیدا می کند؛ هر چند نبایستی فراموش کنیم که اندازه فضایی BE ها نیز نقش مهمی دارد. معنی این نتایج این است که همپوشانی توابع موج الکترون و حفره به جایگزیدگی اکسیتون در همسایگی ناخالصی ها و به اینکه آیا پتانسیل، جاذب الکترون و یا حفره است بستگی دارد. انرژی بستگی اکسیتون و فاصله ترازها در یک چاه کوانتومی به پهنای QW ها نیز بستگی دارد. مثلاً برای GaAs، جدایی بین ترازهای lh و hh در چاه کوانتومی به پهنای چاه ارتباط دارد و این فاصله به مقدار ماکزیمم خود (۳۲ meV) در پهنای $25^\circ \text{\AA}$ خواهد رسید. همینطور محاسباتی که نشان دهنده بستگی انرژی بستگی اکسیتون ها به پهنای چاه ها می باشد در مقاله های متعددی آورده شده است [۱۹،۲۰].

- [١] G. D. Gilliland; *Photoluminescence Spectroscopy of Crystalline Semiconductors*; Materials Science and Engineering, **R18** Nos. 3-6 (1997).
- [٢] K. W. Boer; *Survey of Semiconductor Physics*; John Wiley & Sons Inc. Vol I , chapter 39 (2002).
- [٣] T. Lundstrom; *Theoretical and optical investigation of some III-V based quantum wells and modulation doped heterostructures*; dissertation No.489, Linköping University- IFM, (1996).
- [٤] F. Karlsson; *Single Quantum Dot Spectroscopy by Means of Micro-Photoluminescence with Resonant Excitation*; LiTH-IFM-EX-793; Linköping University (1999).
- [٥] H. Haratizadeh; *Optical Characterization of GaN/AlGaIn Quantum Well Structures*; dissertation No.489, Linköping University- IFM, (2004).
- [٦] C. Kittel; *Introduction to Solid State Physics*, 6th ed.; John Wiley & Sons, New York, Chichester, US (1986).
- [٧] R. Dingle; W. Wiegmann and C. H. Henry; Phys. Rev. Lett. **33**, 827 (1974).
- [٨] A. Pinezuk; J. Shah; R. C. Miller; A. C. Gossard and W. Wiesmann; Solid State Commun. **50**, 735 (1984).
- [٩] G. H. Wannier; Phys. Rev. **52**, 191 (1937).
- [١٠] N. F. Mott; Proc. Royal Soc. **A167**, 384 (1938).
- [١١] J. Frenkel; Phys. Rev. **37**, 1276 (1931).
- [١٢] H. Mathieu; P. Lefebvre and P. Christol; Phys. Rev. B **46**, 4092 (1992).
- [١٣] *Properties of Indium Gallium Arsenides*; ed. P. Bhattacharya (INSPEC, EMIS Datareviews serie No.8, 1993).
- [١٤] M. Notomi; S. Nojima; M. Okamoto; H. Iwamura; T. Tamamura; J. Hammersberg and H. Weman; Phys. Rev. B **52**, 11 073 (1995).
- [١٥] S. Chichibu; T. Azuhata; T. Sota and S. Nakamura; Appl. Phys. Lett. **69** , 4188 (1996).
- [١٦] H. Morkoc; *Nitride Semiconductors and Devices*; ed. By R. Hull; R. M. Osgood; Jr. H. Sakaki, and A. Zunger; Springer-Verlage, (1999).
- [١٧] D. A. B. Miller; D. S. Chemla.; D. J. Eilenberger; P. W. Smith; A.C. Gossard and T. W. Tsang; Appl. Phys. Lett.. **41**, 679 (1982).
- [١٨] G. W. t' Hooft; W. A. J. A. Van der Poel; L. W. Molenkamp and C. T. Foxen; Phys. Rev. B **35**, 8281 (1987).
- [١٩] D. A. Kileinman; Phys. Rev. B **28**, 871 (1983).
- [٢٠] A. Haufe; Solid State Commun. **67**, 899 (1988).

فصل ۴:

نانو ساختارهای کوانتومی گروه تری نیتراید ها و ویژگیهای آنها

- مقدمه
- ساختارهای نامتجانس نیمه هادی
- ساختار چاه های کوانتومی
- انواع چاه های پتانسیل کوانتومی
- کرنش در گروه III- نیترایدها
- محاسبه انفصال نواری در نانو ساختارهای کوانتومی نیتروژندار
- تکنیک اضافه کردن آلایش در لایه سد چاه های کوانتومی

۴-۱- مقدمه

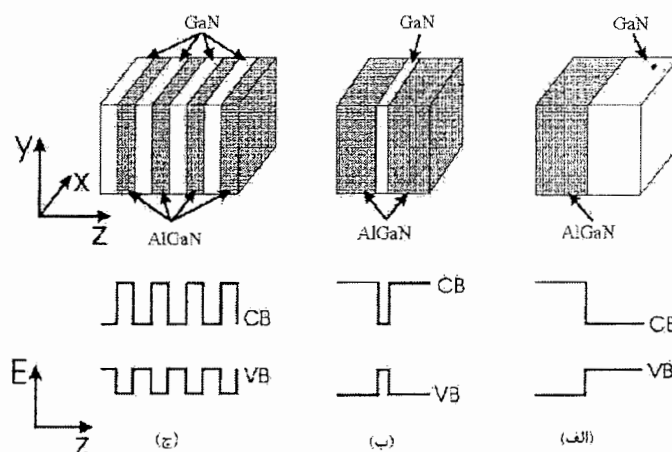
روش های مدرن رشد بلور امکان ساخت لایه های فوق نازک از نیم رساناها را به وجود آورده است. وقتی که یک نیمه رسانا با گاف انرژی کوچکتر بین دو لایه نازک از نیمه رسانای دیگر با گاف انرژی بزرگتر ساندویچ شده باشد، یک چاه کوانتومی تشکیل خواهد شد. در نتیجه الکترون ها و حفره ها فقط در دو بعد آزادی حرکت دارند و در بعد سوم که راستای رشد می باشد و عمود بر لایه های متوالی سد و چاه است الکترون ها و حفره ها محدودیت کوانتومی دارند و در مقابل آنها سد پتانسیل قرار دارد. چاه های کوانتومی در مقایسه با ساختارهای کپه ای بدلیل همپوشانی بیشتر توابع موج الکترون و حفره افزایش چشمگیری در راندمان نوری قطعات اپتوالکترونیکی که از این نانو ساختارها در ناحیه فعال خود بهره می گیرند، را نشان می دهند. در این فصل ابتدا ساختارهای نامتجانس را معرفی کرده و سپس چاه های کوانتومی را بررسی کرده و انواع آن را نشان می دهیم. همچنین اثر کرنش را در نیمه هادی های گروه III-V مورد تحلیل قرار می دهیم.

۴-۲- ساختارهای نامتجانسⁱ نیمه هادی

مطالعه در مورد ساختارهای ناهمگون نیمه هادی با پیش بینی ساخت انواع قطعات جدید با استفاده از آنها توسط ایساکو و تسو در سال ۱۹۶۹ [۱،۲] آغاز شد. پیشرفت در زمینه تکنیک های جدید رشد از قبیل روش برآراستی باریکه مولکولی (MBE) [۳] و رسوب گذاری بخار شیمیایی (MOCVD) [۴] این امکان را فراهم ساخته است که ساختارهای ناهمگون مختلفی را رشد دهیم. در سال ۱۹۷۲ ایساکی و همکارانش [۲] امکان پذیر بودن ساخت چنین قطعات جدیدی را با معرفی

ⁱ Heterostructure

وجود مقاومت منفی در یک ساختار ابر شبکه GaAs/AlGaAs که با روش MBE رشد یافته بود، ثابت کردند. هم اکنون با وجود چنین تکنیک هایی، این امکان فراهم شده است که لایه هایی از نیمه هادی های متفاوت را بر روی یکدیگر به صورت لایه به لایه رشد دهیم. امروزه این امکان فراهم شده است که با تغییر دادن مقدار ترکیب اجزاء تشکیل دهنده یک ساختار ناهمگون و همچنین تغییر در ضخامت لایه های تشکیل دهنده آن، خواص اپتیکی، الکترونیکی و مکانیکی آن را در محدوده وسیعی بررسی کنیم. در شکل ۱-۴ طرح شماتیک ساختار های ناهمگون GaN/AlGaN از قبیل ساختار نامتجانس، چاه کوانتومی و چاه کوانتومی چندگانه به همراه ساختار نواری آنها نشان داده شده است.

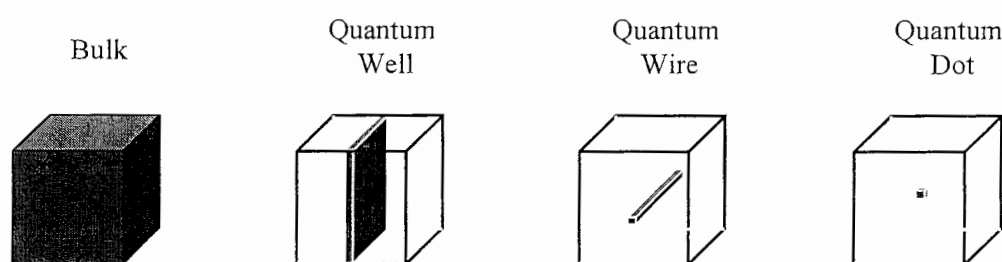


شکل ۱-۴: طرح شماتیک ساختارهای نیمه هادی (الف) نامتجانس (ب) چاه کوانتومی تنها (ج) چاه کوانتومی چندگانه GaN/AlGaN همراه با شکل شماتیکی از ساختار نواری آنها [۵]

لازم به توضیح است که با در نظر گرفتن میدان های قطبشی داخلی ساختارهای فوق و همچنین اثر انتقال بار در سطح مشترک این ساختارها، شکل نوار انرژی تغییر می کند که این دو موضوع به شکل دقیقتر مورد بحث و بررسی قرار خواهد گرفت. در صنعت نیمه هادی ها علاقه مند هستیم که ترکیباتی جدیدتر با خواص اپتیکی و الکترونیکی مناسب تر و بهینه تر بسازیم. شاهی بر این گفته اختراع ترانزیستورهای با تحرک پذیری الکترونی بالا (HEMT) و ساخت چاه های کوانتومی، سیم های کوانتومی^۱ و نقاط کوانتومی می باشد [۶]. در چاه های کوانتومی حامل ها در یک بعد محدودیت

^۱ Quantum Wire

حرکت دارند، لذا همپوشانی توابع موج الکترون و حفره نسبت به حالت نیمه رسانای کپه ای افزایش می یابد همین موضوع در مورد سیم های کوانتومی (QWi) ها صادق است با این تفاوت که حرکت حامل ها به یک بعد و در نقاط کوانتومی (QD) به صفر بعد محدود شده است در شکل ۲-۴ طرح شماتیکی از این ساختارها نشان داده شده است.



شکل ۲-۴: شکل شماتیک ساختار یک نیمه رسانای با ساختار نقطه کوانتومی (QD)، سیم کوانتومی (QWi)، چاه کوانتومی (QW) و نیمه رسانای کپه ای (Bulk) (به ترتیب از سمت راست به چپ)

۳-۴ - ساختار چاه های کوانتومی

همانطور که اشاره شده روش های مدرن رشد بلور مانند برآرایی باریکه مولکولی (MBE) و روش لایه گذاری بخار شیمیایی فلز - ماده آلی (MOCVD) امکان ساخت انواع جدید ساختارهای نیمه هادی و لایه های فوق نازک با کیفیت عالی از نیمه رساناها را بوجود آورده است. اصطلاح فوق نازک به سیستم هایی که ضخامت آنها با شعاع بوهر اکسیژون ماده قابل قیاس باشد، اطلاق می شود. فیلم های نیمه رسانا با ضخامت کمتر از $100 \text{ \AA}$ را به عنوان سیستم های کوانتومی شبه دوبعدی می شناسیم. یک گروه از چنین سیستم های شبه دوبعدی که به صورت مصنوعی رشد داده شده است ساختارهای چاه کوانتومی است. چاه پتانسیل یگانه^۱ یک لایه خیلی نازک (در حدود چند ده آنگستروم) از یک نیمه رساناست که بین دو لایه نازک از نیمه رسانای دیگر با گاف انرژی پهن تر و با ثابت شبکه نزدیک به هم ساندویچ شده است. در شکل ۱-۴ طرح شماتیکی از ساختار نواری و نحوه لایه نشانی در یک چاه کوانتومی یگانه و یک ساختار چاه های کوانتومی چند گانه نشان داده شده است. از آنجائی که دو ماده با گاف نواری متفاوت از هم هستند الکترونها و حفره ها در امتداد محور

^۱ Single quantum well

رشد (محور Z) در یک چاه پتانسیل کوانتومی گرفتار می شوند. چاه های کوانتومی که در این پروژه مورد بررسی قرار گرفته اند همگی از نوع I بوده اند یعنی اینکه گاف نواری چاه از لحاظ انرژی بین گاف نواری ماده سد قرار می گیرد (در شکل ۴-۱ سطح مقطع پتانسیل برای چاه کوانتومی نوع I نشان داده شده است). اگر ضخامت لایه ها به اندازه کافی کوچک باشد، پدیده های کوانتوم مکانیکی خود را نشان می دهند. برای مثال ترازهای انرژی الکترونی کوانتیزه می شوند و از حالت نوار پیوسته به ترازهای انرژی جدا شده و مجزا از یکدیگر تبدیل می شوند. اولین بار دینگلⁱ و همکارانش در سال ۱۹۷۴ در آزمایشات جذب اپتیکی ترازهای انرژی کوانتیزه شده را به طور تجربی مشاهده کردند [۷]. در یک چاه کوانتومی GaN/AlGaN یک لایه نازک از چاه GaN با گاف انرژی کمتر در بین دو لایه AlGaN قرار می گیرد و در نتیجه حامل ها به طور موثری در چاه پتانسیل محدود و محبوس می شوند. و به این ترتیب حامل های فوق فقط آزادند که در صفحه چاه GaN (صفحه x-y) حرکت کنند و در جهت عمود بر صفحه این لایه (جهت z) محدودیت کوانتومی ایجاد می گردد. اغلب به این حامل ها، حامل های شبه دوبعدی (2D) گفته می شود. کلمه "شبه" بر این نکته تاکید می کند که در این سیستم حامل ها در یک چاه کوانتومی نامتناهی گرفتار نیستند و امکان نفوذ برای آنها در ناحیه سد (لایه های AlGaN) وجود دارد. کاری که در این پایان نامه انجام شده شامل ساختارهای ناهمگونی است که در آن حامل ها دارای ویژگی شبه دوبعدی هستند. اگر ساختار شامل چندین چاه کوانتومی باشد به آن ساختار، ساختار چاه کوانتومی چندگانه (MQW) نامیده می شود و بایستی دقت شود که در ساختارهای با چاه های کوانتومی چندگانه پهنای سدها که چاه ها را از یکدیگر جدا می کنند به اندازه ای بزرگ باشد که از هر گونه همپوشانی توابع موج حامل ها در چاه های مجاور هم جلوگیری کند. اگر چنین حالتی اتفاق نیفتد در آن صورت توابع موج حامل ها با یکدیگر برهم کنش می کنند و ترازهای انرژی مجزا از یکدیگر در چاه های کوانتومی پهن خواهد شد و زیر نوارهاⁱⁱ را تشکیل می دهند [۸]. به طور ایده آل ساختارهای چاه کوانتومی چندگانه خواص نوری مشابهی با ساختار چاه کوانتومی یگانه را نمایش می دهند به جز اینکه بازده نوری قطعه ساخته شده با چاه کوانتومی چندگانه بیش از قطعه ساخته شده با چگالی کوانتومی یگانه می باشد. یکی دیگر از ساختارهای مهم

ⁱ Dingle et. al.

ⁱⁱ Miniband

لایه های نازک ابرشبکه ها^۱ هستند، که در آنها هر دو لایه چاه و سد مثلاً GaN و AlGaIn بی نهایت نازک ساخته می شوند، به طور مثال ۱۰۰ لایه از چاه پتانسیلی GaN با ضخامت $50 \text{ \AA}$ بین لایه های AlGaIn به ضخامت $25 \text{ \AA}$ که به عنوان سد پتانسیل عمل می کنند قرار می گیرند. در ابرشبکه ها توابع موج الکترونی در چاه های پتانسیلی مجاور روی هم افتادگی پیدا می کنند که به این علت خواص این ساختار با ساختار چاه های کوانتومی چندتایی تفاوت دارد. علاقه و توجه خاصی در درک سیستم های نیمه رسانا با ابعاد کوچک وجود دارد. کشف جدید اثر هال کوانتومی مثال خوبی از این پدیده های جدید است که می توان در لایه های نازک مشاهده کرد این ساختارها تا حدودی امکان طرح قطعات نیمه رسانا را بر طبق خواص نوری مورد نیاز فراهم می کنند. برای مثال به سادگی می توان لایه جذب چاه های کوانتومی چندتایی GaAs را از مادون قرمز ($\lambda = 820 \text{ nm}$) به قرمز ($\lambda = 650 \text{ nm}$) توسط تغییر پهنای چاه ها جابجا کرد. برای محاسبه ترازهای انرژی در این چاه های کوانتومی، روش مرسوم حل معادله شرودینگر با استفاده از جرم موثر الکترون یا حفره برای پتانسیل موجود در ساختار مورد نظر می باشد:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + V(z) \right] \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z) \quad (1-4)$$

در اولین تقریب انرژی حالت پایه برای چاه مربعی نامتناهی و با فرض یکسان بودن جرم موثر حامل ها در لایه چاه و سد عبارت است از:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m^* L_z^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2-4)$$

اما آنچه عملاً رخ می دهد، محدودیت کوانتومی الکترون ها و حفره ها در چاه های کوانتومی متناهی است که ارتفاع چاه برای الکترون ها همان انفعال نوار رسانش (ΔE_c) بین لایه چاه و سد و برای حفره ها انفعال نوار ظرفیت (ΔE_v) می باشد. نتیجه حل معادله شرودینگر برای چاه پتانسیل متناهی برای ترازهای انرژی پایه عبارتست از [۹]:

$$E = V_0 - \frac{m L_z^2 V_0^2}{2\hbar^2} \quad (3-4)$$

^۱ Superlattice

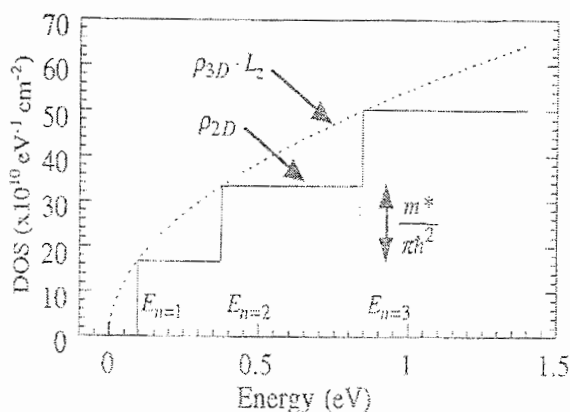
که V_0 در آن عمق پتانسیل (انفصال نواری) می باشد. یکی از ویژگی های مهمی که توسط کوانتیزه شدن در جهت z در چاه های کوانتومی تحت تاثیر قرار می گیرند چگالی حالات (DOS)^۱، $\rho(E)$ ، می باشد که به صورت تعداد حالات در دسترس در واحد حجم در بازه انرژی E تا $E + \Delta E$ تعریف می شود. با فرض وجود یک سیستم دو بعدی با نوارهای سهمی شکل، DOS برای یک زیر نوار خاص توسط رابطه زیر بدست می آید [۱]:

$$\rho_{2D} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \quad (4-4)$$

که به انرژی بستگی ندارد و DOS کل در انرژی داده شده برابر با حاصلضرب ρ_{2D} در تعداد زیر نوارهای پایین تر از این انرژی می باشد. اگر این را با چگالی حالات سه بعدی برای ضخامتی برابر با ضخامت چاه به وسیله ضرب کردن DOS سه بعدی که توسط رابطه

$$\rho_{3D} = \frac{\sqrt{2Em^*}}{\pi^2 \hbar^2} \quad (5-4)$$

داده می شود با L_z مقایسه می کنیم. همانطوری که در شکل ۳-۴ نشان داده شده است مقادیر چگالی حالات دو و سه بعدی در انرژی های E_n با یکدیگر برابر می شوند.



شکل ۳-۴: نمودار چگالی حالات برای سیستم های دو و سه بعدی

چگالی حالت دو بعدی وقتی که n زیاد باشد به چگالی حالات سه بعدی میل می کند. یک تفاوت مهم بین این دو چگالی حالت این است که DOS دوبعدی همیشه یک عدد خاص است و هیچ وقت صفر نمی شود در حالی که در یک سیستم سه بعدی DOS به صفر میل می کند [۱۰].

^۱ Density of State

۴-۴- انواع چاه های پتانسیل کوانتومی

در ساختارهای ترکیبی، تنظیم نوارهای انرژی در فصل مشترک امر مهمی است. همانطور که از شکل ۴-۴ دیده می شود، چندین امکان برای اختلاف گاف انرژی، $\Delta E_g = E_g^B - E_g^A$ ، بین مواد A و B، که یک چاه کوانتومی را تشکیل می دهند، وجود دارد. در چاه کوانتومی نوع I رابطه زیر را می توان نوشت:

$$E_v^A - E_v^B = \Delta E_v > 0 \quad (۴-۶)$$

$$E_c^A - E_c^B = \Delta E_c < 0 \quad (۴-۷)$$

و

$$\Delta E_v, \Delta E_c < E_g^B - E_g^A \quad (۴-۸)$$

توجه شود که برای مشخص کردن کامل ساختار، پارامتر $Q = \Delta E_c / \Delta E_v$ ، که چگونگی قرار گرفتن نوار ظرفیت و نوار هدایت را مشخص می کنند، باید معین شوند. در حال حاضر هیچ قاعده نظری که مقدار Q را در ساختارهای ترکیبی مشخص کند وجود ندارد بطور کلی فرض می شود که بیشتر جابجایی نوار انرژی بین نوارهای هدایت صورت می گیرد. چندین گونه چاه پتانسیل نوع II وجود دارند در اینجا فقط دو شکل آن را مورد بحث قرار می دهیم. اولین نمونه از چاه کوانتومی نوع II در شکل ۴-۴- ب نشان داده شده است شرایط زیر برای چنین ساختاری وجود دارند:

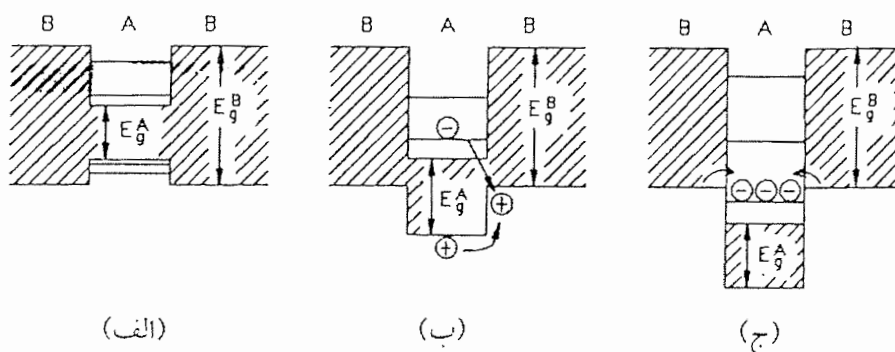
$$E_c^A - E_c^B = \Delta E_c < 0 \quad (۴-۹)$$

$$E_v^A - E_v^B = \Delta E_v < 0 \quad (۴-۱۰)$$

$$\Delta E_v, \Delta E_c < E_g^B \quad (۴-۱۱)$$

و

$$\Delta E_v, \Delta E_c > E_g^B - E_g^A \quad (۴-۱۲)$$



شکل ۴-۴: نمایش طرحواره الف) یک چاه کوانتومی نیمرسانای نوع اول (I)، ب و ج) دو نمونه از ساختار نوع دوم (II) [۱۱]

مقدار صفر انرژی بالای نوار ظرفیت ماده A انتخاب شده است. خواص نوری چاه های کوانتومی نوع II بطور قابل ملاحظه ای با نوع I تفاوت دارد. دلیل آن به علت ناهمترازی فضایی^۱ پایین ترین نوار رسانش در منطقه A و بالاترین نوار ظرفیت در منطقه B است. این امر را می توان به سادگی با در نظر گرفتن اینکه پس از تحریک نوری یک زوج الکترون - حفره، حفره در بالای نوار ظرفیت در ماده A ناپایدار بوده و تمایل به واهلش به پایین ترین تراز انرژی دارد، درک کرد. در نتیجه باز ترکیب زوج الکترون-حفره، به وسیله گسیل یک فوتون از طریق روی هم افتادگی فضایی تابع موج الکترون در ماده A و حفره در ماده B صورت می گیرد. به علت داشتن دنباله نمایی تابع موج درون سد پتانسیل با ارتفاع متناهی، این روی هم افتادگی کوچک است اما صفر نیست. از این دو مشخصه نتیجه می شود: که اولاً، در مقایسه با انرژی فوتون جذب شده، انرژی فوتون گسیل شده به انرژی های پایین تری به مقدار زیاد جابجا می شود:

$$\Delta E = \Delta E_v \quad (۱۳-۴)$$

و ثانیاً، لومینسانس دارای طول عمر طولانی است. به عنوان یک مثال مناسب برای یک چنین چاه کوانتومی نوع II می توان از Si/Ge نام برد. مثال دیگری از چاه کوانتومی نوع II در شکل ۴-۴ ج نشان داده شده است. برای این ساختار شرایط زیر وجود دارد:

$$E_v^A - E_v^B = \Delta E_v < 0 \quad (۱۴-۴)$$

^۱ Spatial misalignment

$$E_c^A - E_c^B = \Delta E_c \langle 0 \quad (15-4)$$

و

$$\Delta E_c \rangle E_g^B \quad (16-4)$$

پایین ترین زیر نوار رسانش در ماده A به لحاظ انرژی پایین تر از بالاترین نوار ظرفیت ماده B قرار می گیرد در نتیجه الکترون ها از نوار ظرفیت پر ماده B به زیر نوار رسانش نوار ماده A منتقل شده و منجر به تشکیل یک ساختار مرکب هادی می شوند . یک مثال از چنین چاه کوانتومی ساختار GaSb/InAs است، که می تواند نامزد خوبی برای آشکارسازهای نوری مادون قرمز باشد [۱۱].

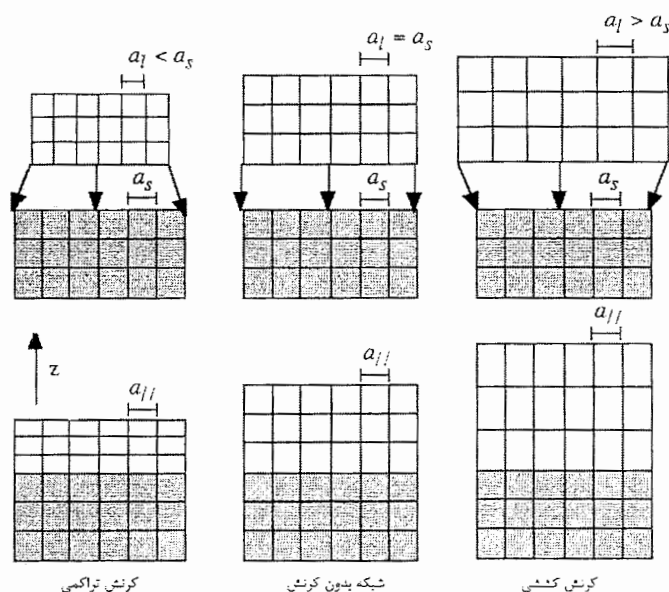
۴-۵- کرنشⁱ در نیمرساناهای نیتروژندار (III-Nitrid semiconductors)

یکی از نکات مهمی که در رشد نیمرساناهای نیتروژندار بایستی به آن توجه شود عدم انطباق ثابت شبکه های زیر لایه های متداول برای رشد نیمرساناهای نیتروژندار، مثل Si و Sapphire و GaAs و InP و ... ، با ثابت شبکه آن می باشد. همچنین ضریب انبساط گرمایی آنها نیز با یکدیگر متفاوت است، که موجب یک تغییر شکل الاستیکی یا کرنش در لایه رشد داده شده روی زیر لایه می گردد. اثر کرنش در نیمه هادی ها خیلی مهم است و از حدود تقریباً ۵۰ سال پیش به خاطر اثراتی که در قطعات اپتوالکترونیکی از خود برجا می گذارد مورد توجه و بررسی قرار گرفته است. این عدم تطبیق در بین لایه های روشنشی شده در ساخت چاه های کوانتومی و ساختارهای ناهمگون تأثیرات پیچیده تری دارد. اگر ضخامت لایه رشد داده شده روی زیر لایه از ضخامت بحرانی، h_c [۱۲]، کمتر باشد این امکان وجود دارد که از لحاظ ترمودینامیکی لایه های پایداری را تولید کنیم و عدم انطباق با یک تغییر شکل الاستیکی لایه ها همراه می شود. در ضخامت های بیشتر از ضخامت بحرانی کرنش تا حدی یا تماماً بوسیله ایجاد شدن دررفتگی ها از بین رفته و آزادⁱⁱ می شود. در اینجا بحث خود را بر روی حالت ایده آل که در آن هیچ دررفتگی در لایه رشد داده شده وجود ندارد، یعنی ضخامت لایه رشد

ⁱ Strain

ⁱⁱ Relax

داده شده کمتر از ضخامت بحرانی است، و بطور همدوس این لایه نازک روی زیر لایه رشد یافته محدود می کنیم. فرض می کنیم که ثابت شبکه در صفحه^۱ سطح مشترک پیوند ناهمگون در تمام ساختار یکسان باقی بماند. برای یک ساختار ناهمگون با ثابت شبکه در صفحه غیر وابسته به مکان، انرژی الاستیکی کل در صورتی مینیمم خواهد شد که ثابت شبکه در صفحه برابر ثابت شبکه تنش نیافته زیر لایه a_s باشد [۱۳]. در شکل ۴-۵ طرح شماتیکی از تغییر شکل الاستیکی به علت عدم انطباق شبکه در یک کریستال دوبعدی نشان داده شده است.



شکل ۴-۵: طرح شماتیکی از تغییر شکل الاستیکی به علت عدم انطباق شبکه در یک کریستال دوبعدی [۱۰]

کرنش در صفحه ϵ_{11} برای لایه رشد داده روی زیر لایه از رابطه زیر بدست می آید:

$$\epsilon_{11} = \frac{a_s}{a_l} - 1 \quad (۱۷-۴)$$

^۱ In plane lattice constant

که در آن a_l ثابت شبکه در صفحه، لایه تنش نیافته و a_s ثابت شبکه در صفحه زیرلایه می باشد با این تعریف ε_{11} برای کرنش کششی ($a_l < a_s$) مثبت خواهد بود و برای کرنش تراکمی ($a_l > a_s$) منفی خواهد بود. لایه نازک متراکم شده یا کشیده شده سعی می کند تا حجم خود را با منقبض یا منبسط کردن ثابت شبکه ای که عمود بر جهت تغییرشکل می باشد، $a_{\perp}$ ، ثابت نگه دارد. نسبت بین کرنش در صفحه^۱، ε_{11} ، و کرنش عمودی، $\varepsilon_{\perp}$ ، توسط رابطه زیر که رابطه پواسون نامیده می شود بدست می آید [۱۴]:

$$\nu = -\frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{11}} \quad (۱۸-۴)$$

برای یک زیر لایه با ساختار ورتسایتس که درجهت [۰۰۱] رشد یافته است، تغییرشکل در لایه رونشینی داده شده به صورت تتراگونال می باشد یعنی یک تغییر شکل یکنواخت دو مولفه ای، یعنی $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ و یک تغییر شکل متفاوت با قبلی در جهت عمود بر کرنش دو مولفه ای فوق، یعنی $\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\perp}$ ، وجود خواهد داشت. رابطه بین تانسور استرس، $[\sigma_{ij}]$ ، و تانسور کرنش، $[\varepsilon_{ij}]$ ، توسط رابطه زیر داده می شود [۱۴]:

$$[\sigma_{ij}] = [C_{ij}][\varepsilon_{ij}] \quad (۱۹-۴)$$

که در آن C_{ij} ها مولفه های تانسور الاستیک هستند. به خاطر وجود تقارن فضایی این تانسور مرتبه چهار به یک ماتریس 6×6 تبدیل می شود. برای کریستال با ساختار ورتسایتس (Wz) ماتریس C_{ij} بصورت زیر ساده می شود [۱۵]:

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \end{bmatrix} \quad (۲۰-۴)$$

^۱ In plane strain

که در آن a_l ثابت شبکه در صفحه، لایه تنش نیافته و a_s ثابت شبکه در صفحه زیرلایه می باشد با این تعریف ε_{11} برای کرنش کششی ($a_l > a_s$) مثبت خواهد بود و برای کرنش تراکمی ($a_l < a_s$) منفی خواهد بود. لایه نازک متراکم شده یا کشیده شده سعی می کند تا حجم خود را با منقبض یا منبسط کردن ثابت شبکه ای که عمود بر جهت تغییر شکل می باشد، $a_{\perp}$ ، ثابت نگه دارد. نسبت بین کرنش در صفحه^۱، ε_{11} ، و کرنش عمودی، $\varepsilon_{\perp}$ ، توسط رابطه زیر که رابطه پواسون نامیده می شود بدست می آید [۱۴]:

$$\nu = -\frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{11}} \quad (۱۸-۴)$$

برای یک زیر لایه با ساختار ورتسایتس که در جهت [۰۰۰۱] رشد یافته است، تغییر شکل در لایه روشنی داده شده به صورت تتراگونال می باشد یعنی یک تغییر شکل یکنواخت دو مولفه ای، یعنی $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ و یک تغییر شکل متفاوت با قبلی در جهت عمود بر کرنش دو مولفه ای فوق، یعنی $\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\perp}$ ، وجود خواهد داشت. رابطه بین تانسور استرس، $[\sigma_{ij}]$ ، و تانسور کرنش، $[\varepsilon_{ij}]$ ، توسط رابطه زیر داده می شود [۱۴]:

$$[\sigma_{ij}] = [C_{ij}][\varepsilon_{ij}] \quad (۱۹-۴)$$

که در آن C_{ij} ها مولفه های تانسور الاستیک هستند. به خاطر وجود تقارن فضایی این تانسور مرتبه چهار به یک ماتریس ۶×۶ تبدیل می شود. برای کریستال با ساختار ورتسایتس (WZ) ماتریس C_{ij} بصورت زیر ساده می شود [۱۵]:

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \end{bmatrix} \quad (۲۰-۴)$$

^۱ In plane strain

وقتی که بلور ورسایتس در صفحه (۰۰۰۱) کرنش یافته و در جهت [۰۰۰۱] آزاد و بدون کرنش باشد (یعنی $\sigma_{xx} \neq 0, \sigma_{yy} \neq 0, \sigma_{xy} = \sigma_{yz} = \sigma_{zx} = 0, \sigma_{zz} = 0$)، تانسور کرنش فقط سه مولفه غیر صفر خواهد داشت که عبارتند از:

$$\varepsilon_{xx} = \frac{a-a_0}{a_0}, \quad \varepsilon_{yy} = \frac{b-a_0}{a_0}, \quad \varepsilon_{zz} = \frac{c-c_0}{c_0} = -\frac{C_{13}}{C_{33}}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \quad (21-4)$$

که در آن a_0 و c_0 ثابت های شبکه بلور ورسایتس تنش نیافته و a, b, c ثابت های شبکه لایه تنش یافته می باشند. اگر کریستال روی یک زیر لایه با ساختار بلوری ورسایتس در جهت [۰۰۰۱] رشد داده شود چون هیچ نیرویی در این جهت به بلور داده نمی شود کرنش بصورت دو مولفه ای متقارن در صفحه (۰۰۰۱) خواهد بود و در همه جهات دیگر صفر خواهد بود و سطر سوم رابطه پواسون بصورت زیر خلاصه می شود:

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \varepsilon_{11} = -2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \varepsilon_{xx} \Rightarrow \nu = 2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \quad (22-4)$$

۴-۵-۱- تئوری پتانسیل تغییر شکل

کرنش تتراگونال در ساختار بلوری ورسایتس به دو بخش تقسیم می شود: مولفه همسانگرد یا هیدرواستاتیک که عبارت است از [۵]

$$\varepsilon_H = Tr(\varepsilon_{ij}) = 2\varepsilon_{11} - \varepsilon_{\perp} \quad (23-4)$$

که تغییر حجم را بدون تغییر دادن تقارن کریستال انجام می دهد و مولفه تک محوری ناهمسانگرد که عبارت است از:

$$\varepsilon_U = \varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{11} \quad (24-4)$$

که در جهت z است و تقارن بلوری را کم می کند. ساختار نوار الکترونی در لایه های کرنش یافته در رشد رونشینی بطور ناهمسانگرد تغییر خواهد کرد. کاهش تقارن بلوری بوجود آمده بوسیله مولفه کرنش تک محوری در جهت z، تبهگنی در حالات نوار ظرفیت در نقطه $\Gamma(K=0)$ را از بین خواهد برد و گاف نواری را تغییر خواهد داد. این اثرات توسط تئوری پتانسیل تغییر شکل [۱۶، ۱۷] مدل سازی

می شود و مولفه کرنش هیدرواستاتیک لبه های نوار ظرفیت رسانش را شیفت خواهد داد. مقدار شیفت برابر است با:

$$\Delta E_c = a_c \varepsilon_H \quad (25-4)$$

$$\Delta E_v = a_v \varepsilon_H \quad (26-4)$$

که در آن a_c و a_v پتانسیل های تغییر شکل هیدرواستاتیک نوارهای هدایت و ظرفیت می باشند. شیفت کل گاف نواری توسط تفاضل شیفت های نوار هدایت و ظرفیت داده می شود یعنی

$$\Delta E_g = \Delta E_c - \Delta E_v = (a_c - a_v) \varepsilon_H \quad (27-4)$$

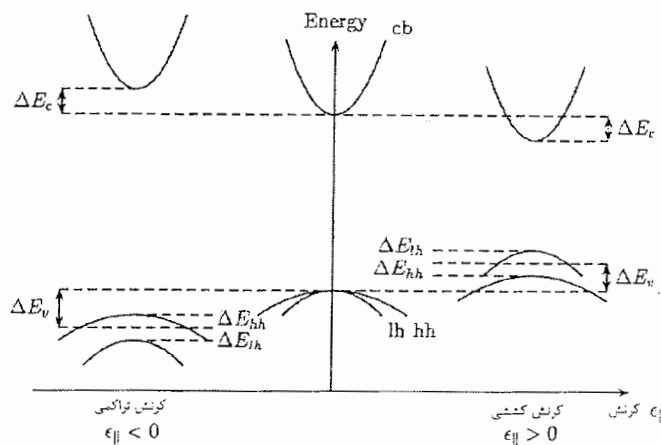
شکافتگی حالات نواری ظرفیت بوجود آمده در اثر کرنش تک مولفه ای (ε_U)، در لبه نوار (نقطه Γ) توسط رابطه زیر محاسبه می شود:

$$\Delta E_{hh} = -\varepsilon_0 \quad (28-4)$$

$$\Delta E_{lh} = -\frac{\Delta_{so} - \varepsilon_0}{2} + \frac{\Delta_{so}}{2} \left[1 + \frac{2\varepsilon_0}{\Delta_{so}} + 9 \left(\frac{\varepsilon_0}{\Delta_{so}} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (29-4)$$

$$\varepsilon_0 = b \varepsilon_U \quad (30-4)$$

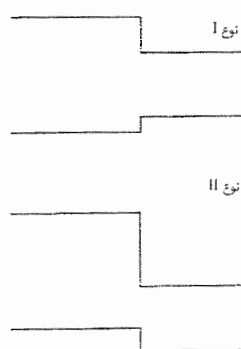
که در رابطه بالا b پتانسیل تغییر شکل پیچشی نوار ظرفیت است که اولین بار توسط *Bir* و *Pikus* [۱۷] تعریف شد. در شکل ۴-۶ شکل شماتیک این شیفت ها و شکافتگی ها را برای کرنش کششی و تراکمی نشان داده ایم.



شکل ۴-۶: طرحواره شماتیک شیفت و شکافتگی ایجاد شده در گاف نواری برای کرنش کششی و تراکمی [۵]

۴-۶- محاسبه انفصال نواری^۱ در نانو ساختارهای کوانتومی نیتروژندار

پیوند ناهمگون دو نیمه هادی غیر مشابه تغییرات شدیدی را در ساختار نوار انرژی در محل پیوند وارد می کند که نتیجه آن انفصال و ناپیوستگی و جابجا شدگی در لبه نوار ظرفیت و هدایت است. آگاهی در مورد انفصال نواری در ساختارهای نامتجانس برای تعیین کردن درجه محدودیت حامل ها در ساختارهای چاه های کوانتومی و نقاط کوانتومی کاملاً حیاتی است. مشخصات اپتیکی و الکتریکی قطعات ساخته شده از ساختارهای نامتجانس، برای مثال ترابری بار در امتداد سطح مشترک و محدودیت بارⁱⁱ در چاه های کوانتومی به طور شدیدی تحت تاثیر نحوه ساختار نواری بین دو نیمه هادی می باشد [۱۸]. پیشرفت تکنولوژی رشد بلور روشنی که منجر شد ساختارهای ناهمگون گروه III-V و ... ساخته شوند، نشان داده اند که این انفصال نواری که از آن صحبت می کنیم در ساختارهای ناهمگون تری نیترایدها نیز دیده می شود [۱۹]. بسته به نحوه تنظیم و قرارگیری نسبی نوارهای انرژی نسبت به یکدیگر حالت های مختلفی از انفصال نواری شکل می گیرد که دو نمونه متداول در شکل ۴-۷ نشان داده شده است.



شکل ۴-۷: طرحواره دو نوع مختلف از انفصال نواری در تری نیترایدها [۱۹]

نوع I که در آن گاف نواری یک ماده کاملاً بین گاف نواری ماده دیگر قرار می گیرد مفیدترین حالت در وسایل اپتوالکترونیکی می باشد. نوع II وقتی اتفاق می افتد که گاف های نواری لایه سد و چاه با یکدیگر همپوشانی کرده اما گاف لایه سد بطور کامل دیگری را محصور نمی کند. انفصال نواری در نیمرساناهای نیتروژندار توسط گروه های مختلف اندازه گیری و محاسبه شده است [۲۰، ۲۱، ۲۲].

ⁱ Band offset

ⁱⁱ Carrier Confinement

نیمرساناهای نیتروژندار ساختارهای ناهمگون مختلف با انفصال نواری متفاوت در نوار رسانش و هدایت تولید می کنند. در جدول ۴-۱ مقادیر آزمایشگاهی و تئوری گزارش شده برای انفصال نواری نوار رسانش (ΔE_c) به نوار ظرفیت (ΔE_v) گردآوری شده است.

جدول ۴-۱: مقادیر اندازه گیری شده و محاسبه شده نسبت انفصال نواری نوار رسانش به ظرفیت در گروه تری نیترایدها

مرجع	$\Delta E_c : \Delta E_v$		
	InN/GaN	GaN/AlN	InN/AlN
مارتین ⁱ و همکاران [۲۳]	۳۰:۷۰	۷۵:۲۵	۶۰:۴۰
ون-د-وال ⁱⁱ و همکاران [۲۴]	۸۰:۲۰	۷۵:۲۵	
وی ⁱⁱⁱ و همکاران [۲۵]	۸۳:۱۷	۷۰:۳۰	۷۵:۲۵

بایستی اشاره شود که مقادیر تجربی بدست آمده توسط مارتین با روش XPS^{iv} بوده است و مقادیر بدست آمده توسط ون - د-وال و وی با محاسبات تئوری بدست آمده است. همانگونه که از جدول فوق واضح است تفاوت بارزی بین مقادیر اندازه گیری شده و محاسبه شده وجود دارد. منشاء این اختلاف شدید به فاکتورهای متفاوتی می تواند مرتبط شود که به موارد زیر می توان اشاره کرد:

- مشکلات تکنیکی و اغلب طبیعت غیرمستقیم اندازه گیری ها
- امکان وابسته بودن انفصال نواری به نحوه آماده سازی سطح مشترک
- وابستگی انفصال نواری به کرنش و قطبش
- اثرات ناشی از بارهای قطبشی

مطالعات مارتین نشان می دهد مقادیر انفصال نواری در یک ساختار ناهمگون A-B بسته به اینکه لایه A روی زیر لایه B رشد داده شود (A/B) یا لایه B روی زیر لایه A رونشانی شود (B/A)، به علت

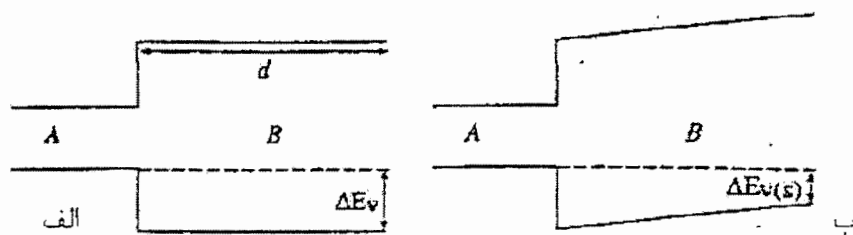
ⁱ Martin et. al.

ⁱⁱ Van De Walle et. al.

ⁱⁱⁱ Wei et. al.

^{iv} X- Ray Photoemission Spectroscopy

بستگی آن به قطبش و اثر پیزوالکتریکⁱ، مقادیر کاملاً متفاوتی دارند. از آنجائی که کرنش باعث بوجود آمدن میدان پیزوالکتریکⁱⁱ می شود، میدان پیزوالکتریک (به فصل ۵ مراجعه کنید) نیز همانطور که از شکل ۴-۸ پیداست باعث بوجود آمدن خمش در نوار هدایت و ظرفیت شده؛ و تغییر در انفصال نواری به وجود خواهد آمد.



شکل ۴-۸: شکل شماتیک الف) یک ساختار نامتجانس که در آن لایه B بر روی لایه A به ضخامت d در حالتی که هیچ میدان خارجی وجود ندارد، رشد یافته است. ب) اثر میدان های قطبشی بر روی انفصال نواری نوار ظرفیت (به وضوح انفصال نواری به مقدار میدان و ضخامت لایه رشد داده شده بستگی دارد). [۱۸]

در موردی که در شکل فوق نشان داده شده است انفصال نواری نوار رسانش با حضور میدان کاهش یافته است، یعنی $\langle \Delta E_v \rangle$ ، $\Delta E_{v(s)}$ ، چون ثابت های پیزوالکتریک لایه های A, B با یکدیگر تفاوت دارند لذا انفصال نواری در ساختار ناهمگون A/B با B/A با یکدیگر تفاوت خواهند داشت. همچنین همانطوری که از روی شکل ۴-۸ واضح است مقادیر انفصال نواری به ضخامت لایه روشنیشی شده نیز بستگی دارد. در این پایان نامه در چاه های کوانتومی از ۷٪ آلومینیوم استفاده شده است و بنابراین با استفاده از قانون وگارد می توان به گاف انرژی AlGaIn در دمای ۲ کلوین دست یافت. در این محاسبه از نسبت ۶۵:۳۵ برای نسبت انفصال نواری نوار رسانش به هدایت استفاده شده است [۲۶].

$$E_g(Al_{0.07}Ga_{0.93}N) = xE_{g_{AlN}} + (1-x)E_{g_{GaN}} - bx(1-x) = 0.07 \times 6.28 + 0.93 \times 3.505 - 0.25 \times 0.07 \times 0.93 = 0.4396 + 3.25965 - 0.0162 = 3.68305_{ev}$$

$$\Delta: E_{g_{AlGaIn}} - E_{g_{GaIn}} = 3.68305 - 3.505 \cong 178_{meV}$$

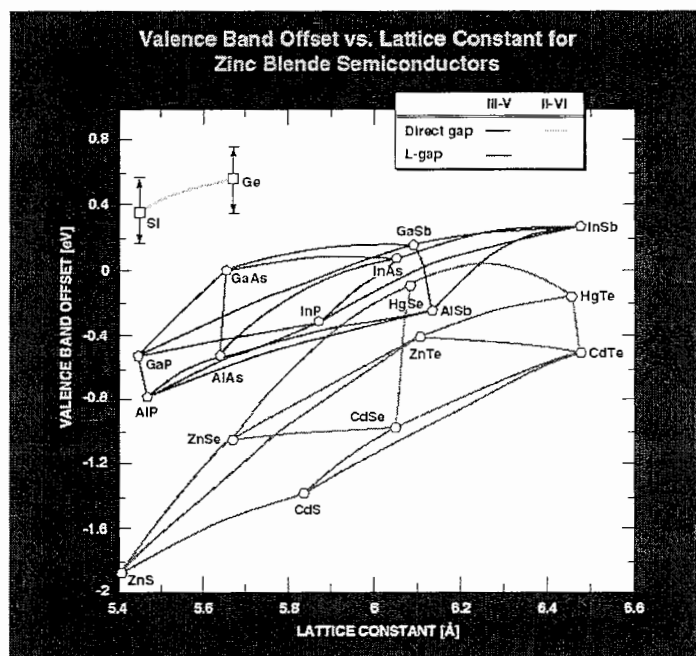
$$Valence \ band \ offset: \frac{35}{100} \times 178 \cong 62_{meV}$$

$$Conduction \ band \ offset: \frac{65}{100} \times 178 \cong 116_{meV}$$

ⁱ Piezoelectric Effect

ⁱⁱ Piezoelectric Field

در شکل ۴-۹ انفصال نواری نوار رسانش برحسب ثابت شبکه در بلورهای با ساختار زینک بلند نشان داده شده است.



شکل ۴-۹: انفصال نواری نوار رسانش بر حسب ثابت شبکه در ساختارهای ZB

۴-۷- تکنیک اضافه کردن آلاینش در لایه سد چاه های کوانتومی^۱

حضور مقدار خیلی کمی از اتم های ناخالصی در نیمه هادی ها می تواند رسانندگی و دیگر خواص فیزیکی ماده را تحت تأثیر قرار دهد. تکنیک های رشد روشستی از قبیل MBE و MOCVD این امکان را فراهم ساخته است که ساختارهایی تحت عنوان ساختارهای آلاینش یافته در سد بسازیم. دقت رشد در این تکنیکها این امکان را فراهم ساخته است که اتم های آلاینشی را در حین فرآیند رشد ساختارهای ناهمگون و چاه های کوانتومی، در لایه های محدود اضافه کنیم. این تکنیک، یعنی اضافه کردن کنترل شده اتم های ناخالصی به یک نیمه هادی (آلاینش)، که اساس بخش مهمی از کار روی نیمه هادی ها را تشکیل می دهد، برای تولید انواع قطعات مختلف از یک دیود دوقطبی تنها تا مدارهای مجتمع پیچیده مانند آنچه در CPU کامپیوترها استفاده می شود، بکار می رود. البته اضافه کردن اتم های ناخالصی به بلور یکسری مسائل جانبی را به همراه خواهد آورد؛ به عنوان مثال اتم های

^۱ Modulation doping technique

ناخالصی، پتانسیل تناوبی بلور را دچار اغتشاش می کنند و همچنین به عنوان مراکز پراکننده برای حامل ها در نیمه هادی ها عمل می کنند. پراکنده شدن حامل ها در محل اتم های آلاینشی، تحرک پذیری حامل ها را محدود می کند؛ و در حقیقت کارایی قطعه را پایین می آورد. یک ترفند مناسب برای رهایی از این مشکل، همانطور که گفته شد استفاده از تکنیک آلاینش دادن سدها در چاه های کوانتومی می باشد.

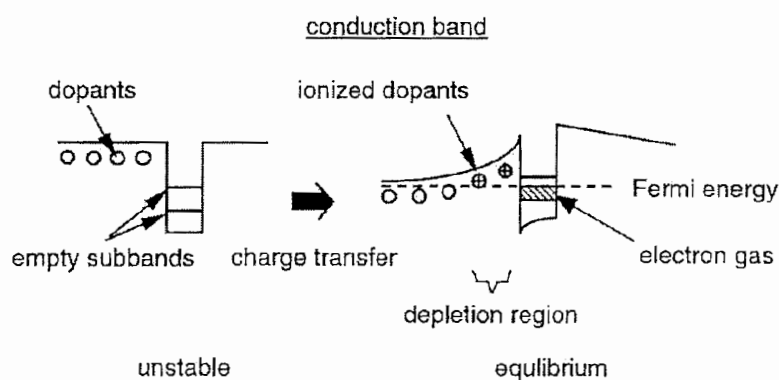
این مفهوم اولین بار توسط /یزاکی و تسوⁱ در سال ۱۹۶۹ [۲۱] معرفی شد و اولین بار به طور تجربی توسط دینگلⁱⁱ و همکارانش [۲۷] در یک ابر شبکه GaAs/AlGaAs مورد استفاده قرار گرفت. با استفاده از این تکنیک می توان الکترون ها را از اتم های آلاینشی در لایه سد جدا کرده و آنها را به لایه چاه هدایت نمود این امر به دلیل اختلاف انرژی فرمی در لایه سد و چاه رخ می دهد. با حضور الکترون ها در لایه چاه و باقیماندن یونها در لایه سد مشکل پراکندگی حاملها از یونها در لایه چاه از میان برداشته می شود و می توان اثر پراکندگی اتم های ناخالصی را کاهش داد؛ این موضوع، تحرک پذیریⁱⁱⁱ حامل ها را شدیداً بهبود می بخشد. این واقعیتی است که هم اکنون در ترانزیستورهای با تحرک الکترونی بالا (HEMT) تحقق یافته است. در مورد چاه های کوانتومی GaN/AlGaN که با ناخالصی نوع n در سدهای AlGaN آلاینش یافته اند، الکترون های اتم های آلاینشی موجود در سدها به داخل چاه های کوانتومی GaN انتقال پیدا می کنند و در ترازهای پایینی داخل چاه قرار می گیرند. این انتقال تا زمانی که انرژی فرمی در دو طرف ساختار برابر شود ادامه می یابد. الکترون های جمع شده در ناحیه فعال، چاه GaN، در یک شکاف پتانسیل باریک نزدیک به سطح مشترک سد و چاه محدود می شوند و تشکیل یک گاز الکترونی شبه دو بعدی (2DEG) می دهند. برای محاسبه پتانسیل الکترواستاتیکی شکل گرفته به وسیله الکترون های داخل چاه و ناخالصی های دهنده یونیزه شده موجود در سد، از معادله پواسون استفاده می شود. پتانسیل الکترواستاتیکی بدست آمده در معادله شرودینگر جایگذاری شده تا ساختار انرژی الکترونی آن و توزیع الکترون ها در داخل چاه بدست آید. معادله شرودینگر و پواسون بایستی به طور پیایی و خودسازگار حل شوند تا ساختار الکترونی نهایی و چگالی الکترونی در چاه پتانسیل بدست آید. در شکل ۴-۱۰ نحوه تشکیل گاز

ⁱ Esaki and Tsu

ⁱⁱ Dingle

ⁱⁱⁱ Mobility

الکترونی دوبعدی و نحوه انتقال الکترون ها به داخل چاه ها نشان داده شده است. در این تز همانطوری که اشاره شد یکسری از نمونه ها توسط اتم های Si در سدها آرایش یافته اند (جدول ۵-۲ را ملاحظه کنید). با افزایش میزان آرایش سیلیکونی در سدها غلظت الکترون های آزاد در درون چاه کوانتومی افزایش پیدا خواهد کرد و نیروی کولنی بین الکترون و حفره را استتار می کنند. بایستی به این نکته اشاره کنیم در نمونه بدون آرایش که در این تز بررسی شده است مکانیزم بازترکیب حامل ها همانطور که بعداً خواهیم دید، در دماهای پایین اکسیتونی می باشد درحالی که مکانیسم بازترکیب در نمونه هایی که آرایش آنها بیشتر از 10^{18} cm^{-2} باشد، در همان دما مکانیسم بازترکیب الکترون آزاد و حفره مقید خواهد شد [۲۸].



شکل ۴-۱۰: شکل یک ساختار کوانتومی آرایش یافته و نحوه تشکیل گاز الکترونی دوبعدی و انتقال الکترون ها به داخل چاه ها (اتم های آرایشی در سد قرار داده شده اند و چاه کوانتومی بدون آرایش می باشد)

- [۱] L. Esaki and R. Tsu; IBM Res. Note RC 2418 (1969).
- [۲] L. Esaki; J. Quant. Elec. **QE- 22**; 1611 (1986).
- [۳] B. A. Joyce; D. D Vedensky and C. T. Foxen; in *Materials Properties and Preparation*; Vol. 3a of Handbook on Semiconductors 2nd ed. By S. Mahjan (Elsevier Science B. V., Amsterdam, The Netherlands, 1994); Chap. 4, P.275-368 .
- [۴] M. Razeghi; in *Materials, Properties and Preparation*; Vol. 3a of Hand book on Semiconductors, 2nd ed., edited by S. Mahjan (Elsevier Science B. V., Amsterdam, The Netherlands, 1994); Chap. 3, P.183-274.
- [۵] T. Lundstrom; *Theoretical and optical investigation of some III-V based quantum wells and modulation doped heterostructures*; dissertation No.489, Linkoping University- IFM, (1996).
- [۶] M. Abe; T. Mimura; K. Nishiuchi; A. Shibatomi; M. Kobayashi and T. Misugi; in *Application of Multi Quantum Wells, Selective Doping, and Superlattice*, Vol. 24 of Semiconductors and Semimetals; edited by R. Dingle (Academic Press, San Diego, USA, 1987), Chap.4, P.240-278.
- [۷] R. Dingle; W. Wiegman and C. H. Henry; Phys. Rev. Lett. **33**, 824 (1974).
- [۸] L. Esaki; *Recent Topic in Semiconductor Physics* (H. Kamimura and Y. Toyozawa, eds). Word Scientific, Singapore, (1983).
- [۹] J.H. Davies; *The Physics of Low-Dimentional Semiconductors, An Introduction*; Cabridge University Press (1998).
- [۱۰] J. Dalfors; Photoluminescence Studids of the electronic Structures in some III-V Quantum Structures; dissertation No.560, P. 8, Linkoping University- IFM, (1999).
- [۱۱] مقدمه ای بر نورشناخت نیمه رساناها، ناصر پیغمبریان، استفان کوچ، آندره میزروویچ، ترجمه دکتر حمید رضا مهاجری مقدم، دکتر حبیب تجلی، چاپ اول، انتشارات آستان قدس رضوی، (۱۳۸۰).
- [۱۲] J. W. Matthews and A. E. Blakeslee; J. Cryst. Growth **27**; 118 (1974).
- [۱۳] C. G. V. de Walle; Phys. Rev. B **39**, 1871 (1989).
- [۱۴] O. Ambacher; J. Majewski; C. Miskys; A. Link; M. Hermann; M. Eickhoff; M. Stutzmann; F. Bernardini; V. Fiorentini; V. Tilak; B. Schaff and L. F. Eastman; J. Phys. Condens. Matter **14** (2002).
- [۱۵] M. Suzuki; T. Uenoyama; *Electronic and Optical Properties of GaN based Quantum Wells, in Group III-Nitride Semiconductor Compounds, Physics and Applications*; ed. By B. Gil (Clarendon. Oxford 1998).
- [۱۶] J. Barden and W. Shockley; Phys. Rev. B **80**, 72, (1950).

- [١٧] G. E. Pikus and G. L. Bir; Soviet Phys. – Solid State **1**, 1502 (1959).
- [١٨] S.C.Jain; M. Willander; J.Narayan; R.Van Overstraeten; J. Appl. Phys. Rev. Vol. **87**, No 3, 965(2000).
- [١٩] H. Morkoc; *Nitride Semiconductors and Devises*; ed. By R. Hull; R. M. Osgood; Jr. H. Sakaki, and A. Zunger; Springer-Verlage, (1999).
- [٢٠] J. R. Waldrop and R. W. Grant, Appl. Phys. Lett. **68**, 2879 (1996).
- [٢١] G. Martin, A. Botchkarev, A. Rockett, and H. Morkoc, Appl. Phys. Lett. **68**, 2541 (1996).
- [٢٢] F. Bernardini; V. Fiorentini; Phys. Rev. B **57**, R, 427 (1998).
- [٢٣] G. Martin; S.Strite; A.Botchkarev; A. Agarwal; A. Rocket; W. R. L. Lambrecht and B. Segall; *Valence band discontinuity between GaN and AlN measured by X-ray photoemission spectroscopy copy*; Appl. Phys. Lett. **65**, 610 (1994).
- [٢٤] C. G. V. de Walle and J. Neugebauer, Appl. Phys. Lett. **70**, 2577 (1997).
- [٢٥] S. Wei and A. Zunger; Appl. Phys. Lett. **69**, 2719 (1996).
- [٢٦] S.C. Jain, M. Willaner, j. Narayan, R. Van Overstraeten, J. Appl. Phys. **87**, 965-1006 (2000).
- [٢٧] R. Dingle; H. L. Stormer; A. C. Gossard and W. Wiegmann; Appl. Phys. Lett. **33**, 665 (1978).
- [٢٨] J. Hammersberg; *Electronic Structure and Optical Properties of InGaAs and InAsP Semiconductor Quantum Wires*; dissertation No.541, Linkoping University- IFM, (1998).

فصل ۵:

معرفی میدانهای قطبشی داخلی در نانو ساختارهای کوانتومی نیتروژندار و محاسبه میدانها در نمونه های مورد مطالعه

- مقدمه
- قطبش پیزوالکتریک
- قطبش خود به خودی
- ساختار نمونه های مورد مطالعه در این پروژه
- اثر کوانتومی محدود شده استارک
- محاسبه اندازه میدان قطبشی پیزوالکتریک و خود به خودی در چاه های کوانتومی
چندگانه $\text{GaN}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$
- میدان تهی و محاسبه مقدار آن در چاه های کوانتومی $\text{GaN}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$
- اثر حامل های آزاد (حامل های آلاشی و تزریقی^۱ و نوری) در فرآیند های باز ترکیب
و استتار میدان های قطبشی داخلی در تری نیترایدها

^۱ Injected carrier

دیگری اختلاف در ضرایب انبساط گرمایی دو لایه که روی یکدیگر رشد داده شده اند؛ هر دوی اینها باعث به وجود آمدن بارهای قطبشی در سطح مشترک دو لایه شده و این بارها منجر به یک میدان به نام میدان پیزوالکتریک می شوند. در ذیل مولفه های قطبش پیزوالکتریک برای چاه های کوانتومی که در این پایان نامه بررسی شده اند بدست می آوریم. همان طور که در بخش (۴-۵) اشاره شد رابطه بین استرس و کرنش به صورت

$$\sigma_i = \sum_j C_{ij} \varepsilon_j \quad (۱-۵)$$

می باشد که مولفه های تانسور الاستیک، C_{ij} ها، در رابطه (۴-۲۰) معرفی شده اند. درمورد نمونه های ما چون جهت رشد بلور، در جهت [۰۰۱] بوده و هیچ نیروی در این جهت به بلور وارد نشده است لذا کریستال کاملاً عاری از استرس در این جهت می باشد و در نتیجه کرنش دو مولفه ای حاصل $(\varepsilon_1 = \varepsilon_2)$ که از آن در بخش ۴-۵ صحبت کردیم، باعث به وجود آمدن استرس های $\sigma_1 = \sigma_2$ می شود و σ_3 نیز برابر صفر خواهد شد. و لذا با استفاده از رابطه (۱-۵) و ماتریس C_{ij} رابطه بین کرنش در امتداد محور c و کرنش در صفحه x-y به صورت [۲]:

$$\varepsilon_3 = -2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \varepsilon_1 \quad (۲-۵)$$

به دست می آید. قطبش پیزوالکتریک برای بلورهای شش گوشه با گروه تقارنی بلوری C_{6v} توسط رابطه زیر داده می شود [۳]:

$$P_i^{Pz} = \sum_l d_{il} \sigma_l \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad l = 1, \dots, 6 \quad (۳-۵)$$

که P_i^{Pz} مولفه های قطبش پیزوالکتریک هستند. با استفاده از رابطه های تقارنی بین d_{il} ها، ($d_{31} = d_{32}$, $d_{15} = d_{24}$, $d_{33} \neq 0$)، خواهیم دید که فقط سه مولفه زیر از قطبش پیزوالکتریک وجود خواهند داشت [۲]:

$$P_1^{Pz} = \frac{1}{2} d_{15} \sigma_5 \quad (۴-۵)$$

$$P_2^{Pz} = \frac{1}{2} d_{15} \sigma_4 \quad (۵-۵)$$

$$P_3^{Pz} = d_{31} (\sigma_1 + \sigma_2) + d_{33} \sigma_3 \quad (۶-۵)$$

با یادآوری این که در مورد نمونه ما $\sigma_1 = \sigma_2$ و $\sigma_3 = 0$ است و استرس های پیچشی خیلی ناچیز در نظر گرفته شده اند. لذا $\sigma_4 = \sigma_5 = 0$ خواهد شد و عملاً فقط مولفه در جهت z قطبش پیزوالکتریک، P_3^{Pz} ، باقی خواهد ماند

$$P_3^{Pz} = 2d_{31}\sigma_1 = 2d_{31}\varepsilon(C_{11} + C_{12} - \frac{2C_{13}^2}{C_{33}}) \quad (7-5)$$

بایستی ذکر کنیم که برای توصیف خواص پیزوالکتریک نیمرساناهای نیتروژندار بیشتر از ضرایب e_{kl} استفاده می شود تا d_{ij} . این ضرایب توسط رابطه زیر بدست می آید:

$$e_{kl} = \sum_j d_{kj} C_{jl} \quad k=1,2,3 \quad l=1,...,6 \quad j=1,...,6 \quad (8-5)$$

و قطبش پیزوالکتریک برحسب کرنش به صورت:

$$P_k^{Pz} = \sum_l e_{kl} \varepsilon_l \quad (9-5)$$

به دست خواهد آمد؛ و در نتیجه تنها مولفه قطبش پیزوالکتریک در نمونه های ما به صورت زیر ساده خواهد شد:

$$P_3^{Pz} = \varepsilon_1 e_{31} + \varepsilon_2 e_{32} + \varepsilon_3 e_{33} \quad (10-5)$$

$$= 2\varepsilon_1 (e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}}) \quad (11-5)$$

$$= 2(\frac{a-a_0}{a_0}) \left[e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right] \quad (12-5)$$

قطبش پیزوالکتریک در حالت کلی هر جهت دلخواهی را می تواند داشته باشد ولی به طور معمول (و البته در مورد نمونه های مورد بررسی در این پایان نامه) جهت آن، در جهت رشد بلور یعنی در امتداد محور C می باشد [۴]. در بخش های بعد این فصل اندازه این میدان را برای نمونه های GaN/Al_{0.07}Ga_{0.93}N به دست خواهیم آورد.

۵-۳- قطبش خود به خودی

همان طور که از نام گذاری این قطبش الکتریکی برمی آید این قطبیدگی به طور خود به خودی در بلور به وجود می آید. در بلورها یا لایه هایی که ساختار ورتسایتس دارند به علت تقارن پایین بلور، مرکز بارهای مثبت و منفی بر روی یکدیگر قرار نمی گیرند و در نتیجه بلور به طور خود به خودی

قطبیده می شود و این قطبیدگی باعث به وجود آمدن میدان الکتریکی در داخل بلور (در این جا چاه های کوانتومی) می شود [۴،۵]. در ادامه اثر این میدان را بر روی طیف PL حاصل از چاه های کوانتومی نیتروژندار به طور تجربی و تئوری بررسی خواهیم کرد. در حقیقت قطبش خود به خودی به این معنی است که حتی در ساختارهای نامتجانسی که لایه و زیر لایه کاملاً بر هم منطبق هستند و هیچ عدم انطباقی وجود ندارد (در حقیقت هیچ کرنشی و پیزوالکتریسیته وجود ندارد) یک میدان الکتریکی به علت قطبش خود به خودی در ساختار وجود خواهد داشت. به علاوه برخلاف قطبش پیزوالکتریک، قطبش خود به خودی دارای جهت ثابتی در ساختار می باشد. در ساختارهای ورتسایتس قطبش خود به خودی در جهت $[0001]$ است که همان امتداد رشد بلور می باشد. در کاربردهای عملی، بیشتر از آلیاژهای نیتروژندار استفاده می شود. از آنجایی که مقادیر قطبش خود به خودی فقط برای ترکیبات دوتایی به دست آمده، در غیاب یک تخمین بهتر، فرض می کنیم که قطبش خود به خودی از قانونی شبیه به قانون وگارد برای آلیاژهای سه تایی و چهارتایی به دست آید. برای مثال در مورد آلیاژهای $Al_xIn_yGa_{(1-x-y)}N$ قطبش خود به خودی از رابطه زیر به دست می آید [۴،۶،۷]:

$$P_{Al_xIn_yGa_{(1-x-y)}N}^{Sp} = xP_{AlN}^{(Sp)} + yP_{InN}^{(Sp)} + (1-x-y)P_{GaN}^{(Sp)} \quad (۱۳-۵)$$

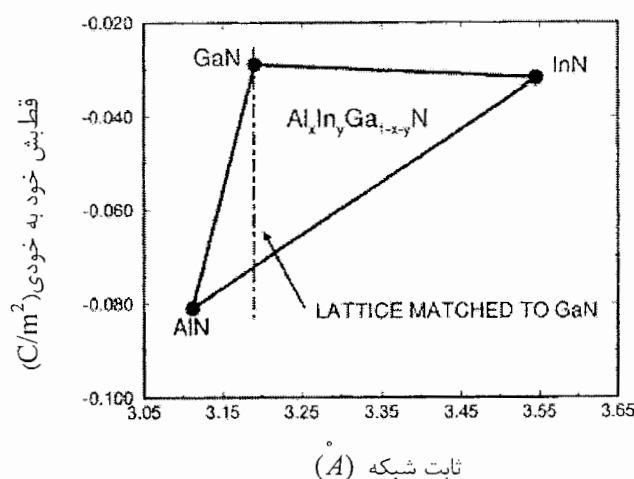
مقادیر قطبش خود به خودی و پیزوالکتریک برای ترکیبات دوتایی تری نیترایدها همراه با بعضی از ضرایب مهم در جدول ۵-۱ آورده شده است. در شکل ۵-۱ با استفاده از داده های مرجع [۸] قطبش خود به خودی برحسب ثابت شبکه در ترکیبات نیتروژندار و آلیاژهای آن رسم شده است.

جدول ۵-۱: مقادیر قطبش خودبه خودی و پیزوالکتریک، ثابت های پیزوالکتریک مهم، ثابت های الاستیک و ثابت شبکه برای تری نیترایدها [۶،۹].

	P_{Sp} (C/m^2)	P_{Pz} (C/m^2)	e_{33} (C/m^2)	e_{31} (C/m^2)	C_{33} (Gpa)	C_{31} (Gpa)	$a(Wz)$ (A)	c/a	ϵ_1
AlN	-۰/۰۹۰	-۰/۰۸۱	۱/۵۰	-۰/۵۳	۳۷۷	۹۴	۳/۱۱۲	۱/۶۰۰۹	۶/۹
GaN	-۰/۰۳۴	-۰/۰۲۹	۰/۶۷	-۰/۳۴	۳۵۴	۶۸	۳/۱۸۹	۱/۶۲۵۹	۱/۸
InN	-۰/۰۴۲	-۰/۰۳۲	۰/۸۱	-۰/۴۱	۲۰۵	۷۰	۳/۵۴۴	۱/۶۱۳۴	۴/۰

ⁱ Bernardini et. al. (1997)

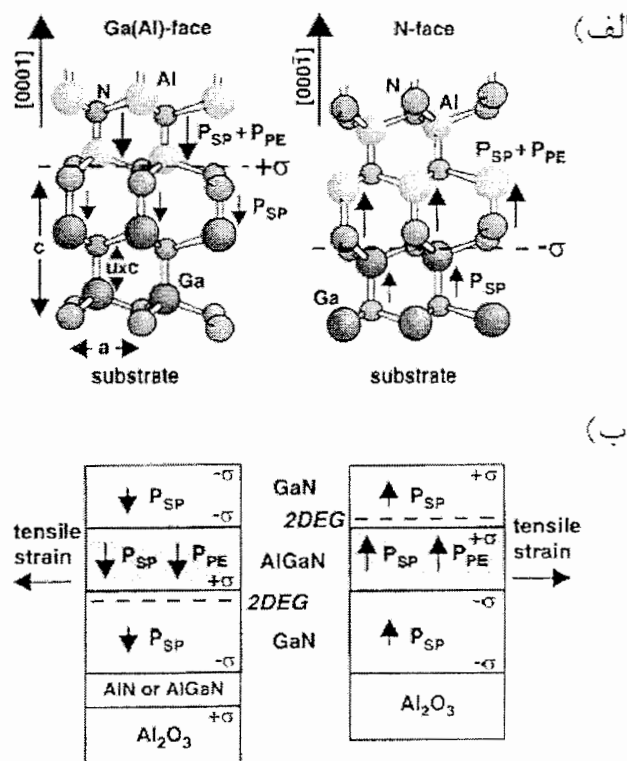
شکل ۵-۱ نشان می دهد که اولاً مقادیر قطبش خود به خودی تقریباً بزرگ هستند و از GaN به InN و AlN افزایش می یابد؛ ثانیاً برای یک ثابت شبکه مفروض بازه وسیعی از مقادیر قطبش خود به خودی با تغییر میزان درصد مولی ترکیبات به دست می آید. در مقام مقایسه در ساختارهایی که بر پایه GaN/AlGaIn بنا نهاده شده اند، مقدار قطبش خود به خودی بزرگتر از مقدار قطبش پیزوالکتریک می باشد.



شکل ۵-۱: مقادیر قطبش خود به خودی محاسبه شده با استفاده از قانون وگارد برای آلیاژهای $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{(1-x-y)}\text{N}$ [۴].

نکته مهم دیگری که در این جا بایستی به آن اشاره کنیم این است که قطبش با پلاریتی کریستال ارتباط مستقیم دارد یعنی بسته به اینکه در امتداد محور C (جهت رشد)، پیوندها از کاتیون به سمت آنیون باشد یا آنیون به سمت کاتیون جهت قطبش فرق خواهد کرد. در ترکیبات نیتروژندار، جهت مثبت برای تعریف جهت میدان های قطبشی، از اتم کاتیون به نزدیکترین همسایه نیتروژن (اتم آنیون) در امتداد محور C تعریف می شود [۱۰]. وقتی که پیوندها در امتداد محور C از اتم کاتیون (Ga) به سمت اتم آنیون (N) باشد، به این نوع پلاریتی، پلاریتی گالیم (Ga) گفته می شود و جهت پیوندها از Ga به N در امتداد محور C نشان دهنده جهت $[0001]$ می باشد، که عموماً همان جهت Z است و به طور مشابه اگر پیوندها در امتداد محور C از اتم آنیون (N) به سمت اتم کاتیون (Ga) باشد، به پلاریتی، پلاریتی نیتروژن (N) گفته می شود و جهت پیوند از اتم نیتروژن به اتم Ga در

امتداد محور C نشان دهنده جهت $[0001]$ می باشد. که عموماً جهت Z- می باشد. وقتی یک لایه بافر از GaN روی زیر لایه Sapphire با روش رشد MOCVD رشد داده شود سطح لایه با اتم های Ga پوشیده خواهد شد و نمونه اصطلاحاً Ga-face خواهد شد. یعنی لایه آخر در این روش رشد، با اتم های Ga پوشیده خواهد شد؛ در حالی که اگر همین لایه توسط روش MBE رشد داده شود نمونه N-face خواهد شد و جهت میدان خود به خودی تغییر خواهد کرد و معکوس خواهد شد. در هر حال جهت قطبش خود به خودی در بلورهای با ساختار ورتسایتس یک امتداد ثابت یعنی راستای رشد کریستال می باشد [۱۰]. در شکل ۵-۲ طرح شماتیکی از یک ساختار نامتجانس AlN/GaN و GaN/AlGaIn/GaN همراه با جهت قطبش های داخلی در نمونه های Ga-face و N-face نشان داده شده است.



شکل ۵-۲: الف) شکل شماتیک ساختار بلوری، بارهای قطبسی و جهت میدان های قطبشی در ساختار ناهمگون AlN/GaN که به صورت Ga-face و N-face رشد یافته است. ب) نمایش قطبش خود به خودی و پیزوالکتریک و محل تشکیل گاز الکترونی دو بعدی در ساختار ناهمگون GaN/AlGaIn/GaN که به صورت Ga-face و N-face رشد یافته است [۱۰].

چون برای آلیاژهای $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ به ازای هر مقداری از x مقدار $(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}})$ منفی می باشد در نتیجه قطبش پیزوالکتریک در لایه های AlGaIn تنش یافته با کرنش کششی، منفی است و برای کرنش تراکمی مثبت خواهد بود. در نتیجه جهت قطبش پیزوالکتریک و خود به خودی در مورد کرنش کششی یکسان خواهد بود و در مورد کرنش تراکمی غیر هم جهت خواهد بود (شکل ۵-۲ را ملاحظه کنید) [۱۰].

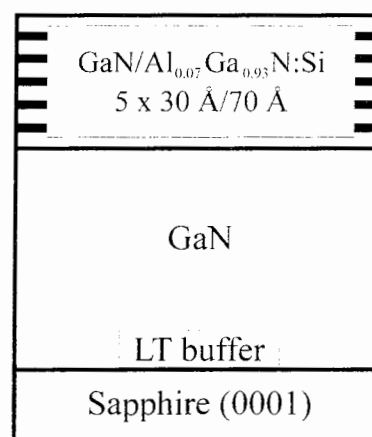
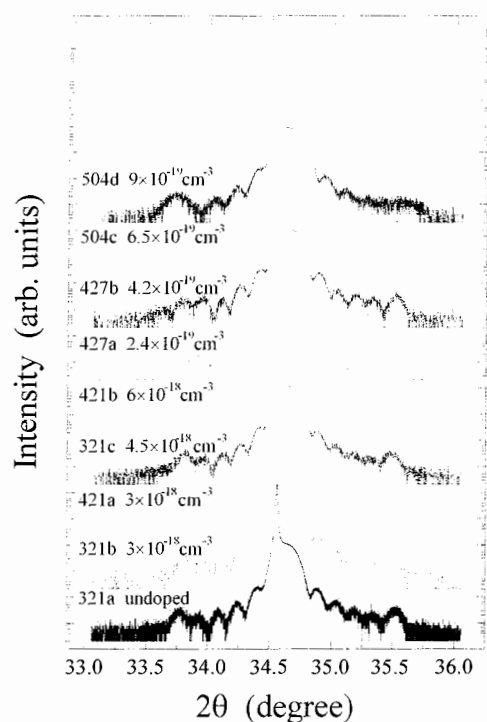
۵-۴- ساختار نمونه های مورد مطالعه در این پروژه

نمونه های مورد مطالعه یک دسته از چاه های کوانتومی چندگانه $\text{GaN}/\text{Al}_{0.7}\text{N}_{0.3}/\text{Ga}$ می باشد که تمامی این نمونه ها با روش رسوب گذاری بخار شیمیایی (MOCVD) بر روی زیرلایه Sapphire و در جهت [۰۰۰۱] رشد یافته اند. روی زیرلایه یک لایه میانی با دمای پایین از جنس AlN به ضخامت ۲۰ nm جهت پایداری لایه ها و یک لایه بافر GaN بدون آلاینش به ضخامت تقریبی ۲ μm رشد داده شده است. به دلیل حضور لایه ضخیم GaN اثر عدم انطباق ثابت شبکه زیر لایه اکسید آلومینیم با ثابت شبکه در ناحیه فعال قابل اغماض خواهد بود. بعد از لایه GaN بافر، ناحیه فعال که شامل پنج لایه متناوب از چاه های کوانتومی GaN و سدهای AlGaIn می باشد رشد داده شده است. جزئیات نمونه ها در جدول شماره ۵-۲ نشان داده شده است. همچنین در شکل ۵-۳ طرح شماتیکی از نمونه های مورد بررسی با پهنای چاه ۳ nm و سد ۷ nm نشان داده شده است. تمام نمونه ها در ناحیه سد، توسط اتم های سیلیکون آلاینش یافته اند و مقدار آلاینش از 10^{16}cm^{-2} (چگالی ذاتی الکترون ها در GaN) تا حدود $9 \times 10^{19} \text{cm}^{-2}$ متغیر می باشد. باید اشاره کنیم که ضخامت لایه ها با روش پراش اشعه xⁱ (XRD) بدست آمده است. طیف XRD نمونه ها در شکل ۵-۴ نشان داده شده است.

ⁱ X-ray diffraction

جدول ۵-۲: میزان آلاینش Si، پهنای چاه، درصد آلومینیم و پهنای سد در چاه های کوانتومی مورد بررسی (همه نمونه ها در سد آلاینش یافته اند)

پهنای سد ($^{\circ}$ A)	درصد Al	پهنای چاه ($^{\circ}$ A)	غلظت حامل ها (cm^{-3})
۷۲	۰/۰۷	۳۰	بدون آلاینش
۷۲	۰/۰۷	۳۰	$3/0 \times 10^{18}$
۷۶	۰/۰۷	۳۱	$6/0 \times 10^{18}$
۷۴	۰/۰۷	۳۰	$2/4 \times 10^{19}$
۷۵	۰/۰۷	۳۱	$4/2 \times 10^{19}$
۷۰	۰/۰۷	۳۰	$6/5 \times 10^{19}$
۷۰	۰/۰۷	۳۰	$9/0 \times 10^{19}$

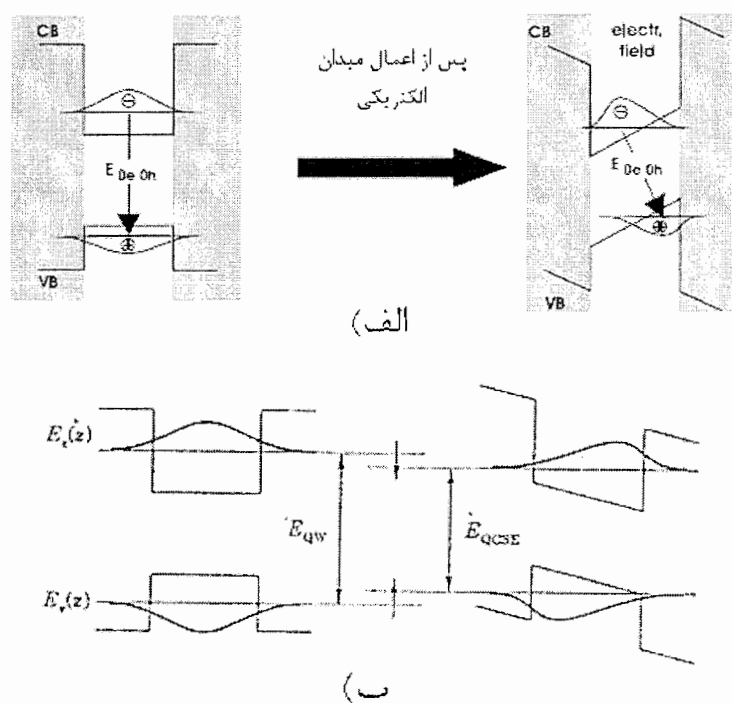


شکل ۵-۴: طیف XRD نمونه های مورد بررسی در پایان نامه

شکل ۵-۳: شکل شماتیکی از چاه های کوانتومی چندگانه GaN/AlGaInN با پهنای چاه ۳nm

۵-۵- اثر کوانتومی محدود شده استارک^۱

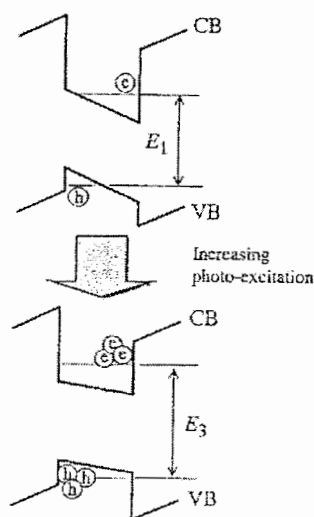
میدان های قطبشی داخلی که در جهت محور z در چاه کوانتومی نیتروژندار (چاه های کوانتومی چندگانه GaN/AlGaIn در این پروژه) به وجود می آیند باعث خمش چاه پتانسیل و در نتیجه هدایت توابع موج الکترون ها و حفره ها به دیواره های مقابل در داخل چاه پتانسیل می گردند و در نتیجه انرژی حالت پایه الکترون و حفره دستخوش تغییر شده و کاهش می یابد. در شکل ۵-۵ این موضوع با یک طرح شماتیک نشان داده شده است. این شیفت در انرژی گسلی حاصل از بازترکیب الکترون ها و حفره ها در نتایج حاصل از لومینسانس بوضوح دیده می شود و به عنوان اثر کوانتومی محدود شده استارک (QCSE) معروف است. حرکت حامل ها به دو طرف مقابل هم باعث کاهش همپوشانی توابع موج الکترون و حفره و در نتیجه کاهش احتمال بازترکیب می گردد. این اثر در چاه های کوانتومی که از نیم رساناهای نیتروژندار ساخته می شوند نسبتاً قوی می باشد [۱۱، ۱۲].



شکل ۵-۵: الف) طرح شماتیک یک چاه کوانتومی اغتشاش نیافته و اغتشاش یافته در اثر وجود میدان های قطبشی داخلی [۲]. ب) مقدار کاهش در انرژی حاصل از بازترکیب حامل ها در چاه کوانتومی، ناشی از اثر کوانتومی استارک به وضوح نشان داده شده است [۱۱].

^۱ Quantum Confined Stark Effect (QCSE)

در ساختارهای چاه کوانتومی $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ این شیفت انرژی حاصل از بازترکیب تحت تاثیر عوامل مختلفی از جمله چگالی حامل های آلاشی و نوری قرار می گیرد. شکل ۵-۶ به این موضوع اشاره دارد. در حقیقت می توان با وارد کردن مقادیر زیادی حامل های بار با تکنیک ها و روش های مختلف میدانهای قطبشی به وجود آمده در چاه ها را کاهش داد.



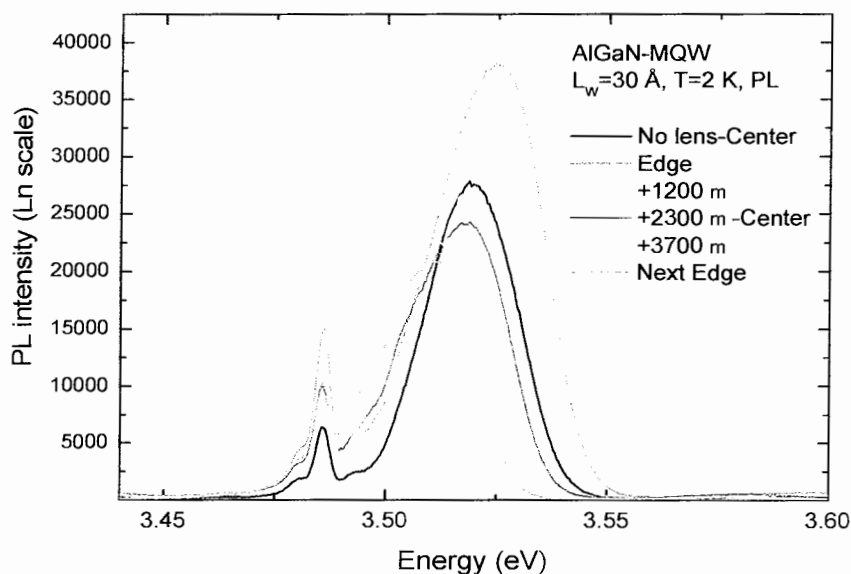
شکل ۵-۶: کاهش اثر محدود شده کوانتومی استارک در اثر افزایش حامل های نوری در یک چاه کوانتومی (به کاهش خمیدگی کف چاه پتانسل که ناشی از استتار موثر میدان های داخلی چاه می باشد توجه کنید).

۵-۶- محاسبه اندازه میدان قطبشی پیزوالکتریک و خود به خودی در چاه های کوانتومی

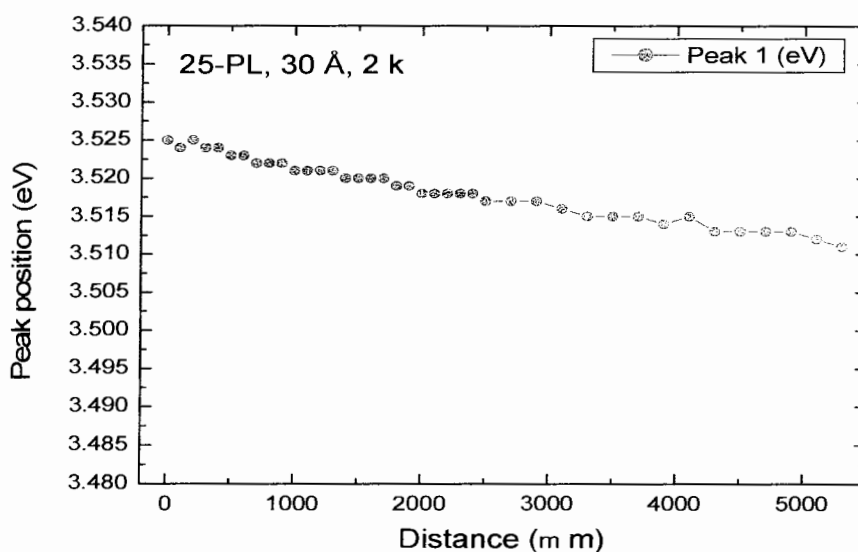
چندگانه $\text{GaN}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$

در این قسمت اندازه میدان های قطبشی پیزوالکتریک و خود به خودی که در بخش های قبل معرفی شدند را محاسبه می کنیم. البته باید به این نکته اشاره کنم که اندازه این میدان به صورت موضعی و از یک محل به محل دیگر در یک چاه کوانتومی مفروض تغییر خواهد کرد و ما به صورت تقریبی و برای انجام این محاسبه اندازه آن را یکنواخت در نظر می گیریم. در شکل ۵-۷ طیف فوتولومینسانس نمونه بدون آلاش و با پهنای چاه ۳nm در نقاط مختلف در عرض این نمونه نشان داده شده است. همانطور که از شکل مشخص است افت و خیزهایی را در موقعیت قله مشاهده می کنیم که برای اینکه به طور واضح دیده شود در شکل ۵-۸ محل پیک طیف فوتولومینسانس حاصل از چاه کوانتومی برای این نمونه در صورتیکه نور لیزر فرودی عرض نمونه ها را با فاصله ۱۰۰

میکرون جاروب می کند نشان داده شده است. این افت و خیزها مربوط به تغییر میدان قطبشی پیزوالکتریک محلی در نقاط مختلف در سر تا سر نمونه به دلیل وجود تنشهای موضعی در مرحله رشد نمونه و نیز غیر یکنواختی توزیع Al در سد AlGa_N می باشد. تغییرات میدانهای قطبشی محلی در میزان شیف انرژی به دلیل اثر کوانتومی استارک بر روی جابجایی قله مربوط به چاههای کوانتومی، مؤثر است.



شکل ۵-۷: جابجایی قله های فوتولومینسانس در چاههای ۳nm هنگامیکه باریکه نور لیزر فرودی در عرض نمونه ها جابجا می شود



شکل ۵-۸: تغییرات ۱۰۰ میکرونی از جابجایی قله های فوتولومینسانس در سرتاسر نمونه ۳۰ Å

با فرض اینکه ثابت شبکه تنش یافته برای چاه های GaN در دماهای پایین در حدود $3/183 \text{ \AA}$ باشد [۲،۱۳]، در این صورت همان طور که گفته شد تنها مولفه قطبش پیزوالکتریک در مورد نمونه های ما از رابطه زیر به دست می آید:

$$P^{(Pz)} = \frac{2(a-a_0)}{a_0} \left[e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right] \quad (۱۴-۵)$$

که در آن a و a_0 به ترتیب ثابت های شبکه تنش یافته و تنش نیافته می باشند. با استفاده از مقادیر $a_0 = 3/189 \text{ \AA}$ و $a = 3/183 \text{ \AA}$ برای چاه های GaN و استفاده از مقادیر $e_{31} = -0.34 (c/m^2)$ و $e_{33} = 0.67 (c/m^2)$ و $\frac{C_{13}}{C_{33}} = 0.28$ [۲]، مقدار قطبش پیزوالکتریک برای چاه های GaN، $P^{Pz} = 0.002 (c/m^2)$ بدست می آید. در مورد سدهای GaN/Al_{0.7}Ga_{0.3}N مقدار a_0 برابر $3/183 \text{ \AA}$ است. و اگر از مقدار a فوق استفاده کنیم، $P^{Pz} = 0$ خواهد شد. در مورد قطبش خود به خودی نیز با استفاده از قانون وگارد و استفاده از مقادیر جدول ۵-۱ مقدار قطبش خود به خودی برای سدها و چاه ها به ترتیب:

$$P_{AlGaN}^{Sp} = -0.038 (c/m^2) \quad (۱۵-۵)$$

$$P_{GaN}^{Sp} = -0.034 (c/m^2) \quad (۱۶-۵)$$

به دست می آید. در نتیجه قطبش کل برای سدهای AlGaIn و چاه های GaN به صورت:

$$P_{tot}^{AlGaIn} = P_{AlGaIn}^{(Sp)} + P_{AlGaIn}^{(Pz)} = -0.038 (c/m^2) \quad (۱۷-۵)$$

$$P_{tot}^{GaIn} = P_{GaIn}^{(Sp)} + P_{GaIn}^{(Pz)} = -0.032 \quad (۱۸-۵)$$

به دست می آید. حال با داشتن مقدار قطبش کل و استفاده از رابطه های [۴]

$$E_w = (P_b - P_w)L_w / [(L_w + L_b)\epsilon_0\epsilon] \quad (۱۹-۵)$$

برای چاه های GaN و

$$E_b = (P_w - P_b)L_w / [(L_w + L_b)\epsilon_0\epsilon] \quad (۲۰-۵)$$

برای سدهای AlGaIn و استفاده از مقادیر عددی $L_w = 3 \text{ nm}$ و $L_b = 7 \text{ nm}$ و $\epsilon = 10$ مقدار E_w و E_b برای نمونه بدون آلایش به صورت زیر به دست می آید:

$$E_w = -0.48 (MV/cm) \quad (۲۱-۵)$$

$$E_b = +0.20 \text{ (MV/cm)} \quad (22-5)$$

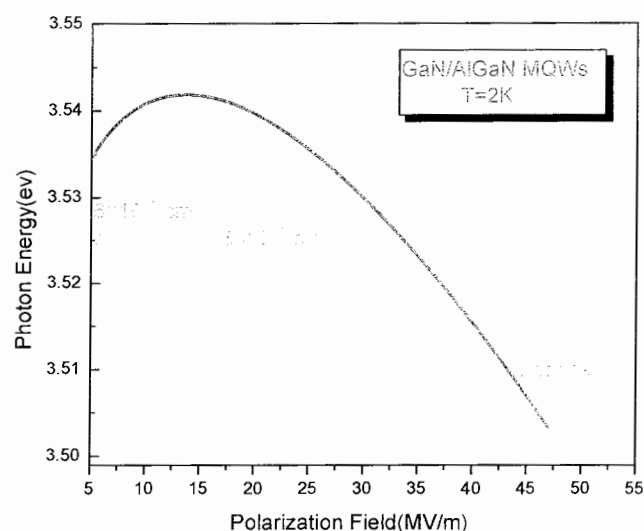
در مورد نمونه های آلاینش یافته مقدار میدان قطبشی کل در چاه ها از رابطه [14,17]:

$$E_w^{tot} = (eN_s + P_b - P_w)L_b / [(L_w + L_b)\epsilon_0\epsilon_r] \quad (23-5)$$

بدست می آید که به ترتیب برای نمونه های با آلاینش $(\text{cm}^{-3}) 3 \times 10^{18}$ و $(\text{cm}^{-3}) 6 \times 10^{18}$ مقادیر به ترتیب $21/3 \text{ (MV/m)}$ و 6 به دست می آید. همانطور که گفته شد در حضور یک میدان الکتریکی چاه پتانسیل مربعی خمیده شده و به یک چاه مثلثی [15,16] در تقریبی خیلی ساده تبدیل می شود با استفاده از رابطه [17]:

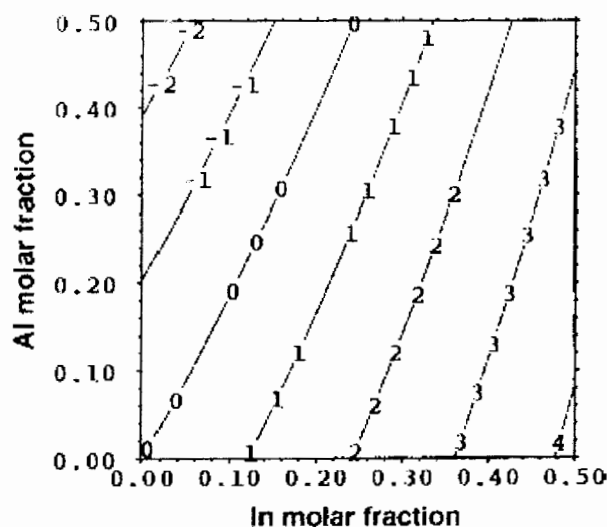
$$E_{e-hh} = E_g - E_w L_w^{eff} + \left[\frac{9\pi\hbar e E_w}{8\sqrt{2}} \right]^{\frac{2}{3}} \left[\left(\frac{1}{m_e^*} \right)^{\frac{1}{3}} + \left(\frac{1}{m_h^*} \right)^{\frac{1}{3}} \right] \quad (24-5)$$

می توان انرژی بازترکیب حاصل از حفره سنگین و الکترون را در تراز پایه به دست آورد، که در آن L_w^{eff} پهنای موثر چاه کوانتومی می باشد، با استفاده از مقادیر عددی $m_{GaN,e} = 0.22m_0$ و $m_{GaN,hh} = 1.76m_0$ برای جرم های موثر [18]، می توان انرژی بازترکیب بین حفره و الکترون در تراز پایه را به دست آورد. با رسم نمودار انرژی پیک حاصل از QW ناشی از بازترکیب الکترون و حفره سنگین در تراز پایه برحسب مقدار میدان الکتریکی قطبشی در آلاینش های مختلف می بینیم که توافق خوبی بین مقادیر انرژی گذار در تراز پایه $E_{e,hh}$ ، که با این تئوری ساده پیش بینی می شود، و گسیل انرژی PL برای نمونه های بدون آلاینش و آلاینش پایین وجود دارد (شکل ۵-۹ را ملاحظه کنید. توجه کنید که هنگامی که انرژی جایگزیدگی اکسیتون در نظر گرفته شود، نقاط تجربی شکل ۵-۹ به اندازه $6-14 \text{ meV}$ به طرف بالا شیفت پیدا خواهند کرد. با افزایش آلاینش سیلیکونی، استتار میدان های قطبشی افزایش یافته در نتیجه $E_{e,hh}$ به سمت انرژی های بیشتر شیفت پیدا خواهد کرد. بایستی اشاره کنیم که رابطه (۲۴-۵) فقط در آلاینش های پایین صادق می باشد و در آلاینش های سیلیکونی بالا اعتبار ندارد.

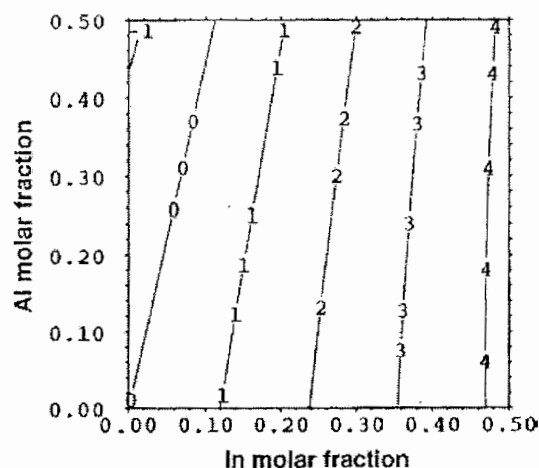


شکل ۵-۹: انرژی محاسبه شده حاصل از باز ترکیب بین الکترون و حفره سنگین در تراز پایه، $E_{e,hh}$ ، در تقریب چاه کوانتومی مثلثی که به اندازه انرژی بستگی اکسیتون، 2 meV ، در حالت نبود میدان الکتریکی کاهش یافته است؛ همراه با انرژی پیک QW در چند نمونه با آلایش های پایین.

میدان های قطبشی داخلی به مقدار ترکیب های (درصد مولی) مواد سازنده چاه کوانتومی ارتباط مستقیم دارد. فرض کنید یک چاه کوانتومی چندگانه $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{(1-x-y)}\text{N}/\text{GaN}$ که روی زیر لایه GaN رشد یافته، در اختیار داریم. مقادیر میدان قطبشی کل که به روش تئوری به دست آمده برحسب درصدهای مولی In و Al در شکل ۵-۱۰ نشان داده شده است. مولفه پیزوالکتریک میدان قطبشی کل نیز در شکل ۵-۱۱ برحسب درصد مولی In و Al نشان داده شده است.



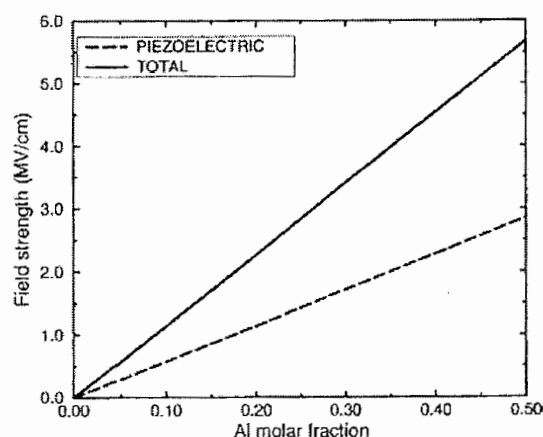
شکل ۵-۱۰: میدان قطبشی الکترواستاتیکی کل در ناحیه فعال چاه کوانتومی چندگانه $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{(1-x-y)}\text{N}/\text{GaN}$ برحسب درصد مولی Al و In (میدان ها در روی شکل بر حسب MV/cm) بیان شده اند و جهت مثبت میدان راستای $[0001]$ فرض شده و نمونه Ga-face می باشد [۴].



شکل ۵-۱۱: مولفه پیزوالکتریک میدان قطبشی الکترواستاتیکی کل در ناحیه فعال چاه کوانتومی چندگانه بحث شده در شکل ۵-۸ [۴].

در هر دو مورد قانون وگارد برای محاسبه اندازه میدان ها استفاده شده است. مقایسه این دو شکل، نقش مهم قطبش های خود به خودی را در میدان الکتریکی موجود در داخل چاه کوانتومی مورد بحث را روشن می کند. در نگاه اول به این نمودارها چند نکته اساسی به نظر می رسد. اول اینکه در غلظت های مولی متوسط از Al و In میدان های الکتریکی تقریباً بزرگی $(\frac{MV}{cm} - 1 - 0.5)$ بدست می آید. ثانیاً به راحتی می توان درصد مولی ترکیباتی از $Al_xIn_yGa_{(1-x-y)}N$ را پیدا کرد که از لحاظ ثابت شبکه با GaN منطبق می باشد. و در نتیجه هیچ میدان پیزوالکتریکی در آن وجود نداشته باشد. این حالت وقتی حاصل می شود که بر روی خط صفر در شکل ۵-۱۱ قرار داشته باشیم. همچنین می توان به درصدهای مولی ترکیباتی از $Al_xIn_yGa_{(1-x-y)}N$ دست یافت که برای آنها هیچ میدان الکتریکی در ناحیه فعال وجود نداشته باشد. برای تحقق چنین حالتی بایستی ناحیه فعال چنان کرنش پیدا کند که میدان ناشی از قطبش پیزوالکتریک و خود به خودی همدیگر را خنثی کنند؛ و این در درصدهای مولی که در روی خط صفر شکل ۵-۱۰ نشان داده شده به دست می آید. یک نکته قابل ملاحظه دیگر در شکل ۵-۱۱ این است که میدان پیزوالکتریک با افزایش درصد In بسیار سریعتر نسبت به افزایش درصد Al افزایش پیدا می کند. در شکل ۵-۱۲ نیز مقدار میدان قطبشی کل و میدان پیزوالکتریک برحسب درصد Al برای یک چاه کوانتومی $GaN/Al_xGa_{(1-x)}N$ به دست آمده و

نشان داده شده است. میدان خود به خودی بالطبع تفاضل دو مقدار فوق در هر غلظت مولی دلخواه x می باشد [۴].



شکل ۵-۱۲: میدان قطبشی کل و مولفه پیزوالکتریک آن در چاه کوانتومی $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ که با استفاده از قانون وگارد محاسبه شده است [۴].

۵-۷- میدان تهی و محاسبه مقدار آن در چاه های کوانتومی $\text{GaN}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$

علاوه بر میدان های پیزوالکتریک و خود به خودی که به ترتیب به دلیل کرنش درمواد لایه و زیر لایه و عدم تقارن در ساختار بلوری ورتسایتس وجود دارند، میدانی دیگری به نام میدان تهی در این ساختارها وجود دارد. در این ساختارها به علت وجود حالت های سطحی، سطح فرمی در لایه های فوقانی ناحیه فعال با یکدیگر هم تراز و یکسان نمی باشد و این باعث می شود الکترونها از سطح خارجی نمونه به داخل چاه های داخلی تر تخلیه و سرازیر شوند؛ و این به نوبه خود باعث به وجود آمدن میدان تهی می شود [۱۹، ۱۰]. در این بخش ما اندازه و برد این میدان را برای دو نمونه بدون آلاینش و آلاینش خیلی زیاد محاسبه می کنیم. پهنای ناحیه تهی که در اثر وجود میدان تهی به وجود می آید از رابطه زیر تخمین زده می شود [۲۰]:

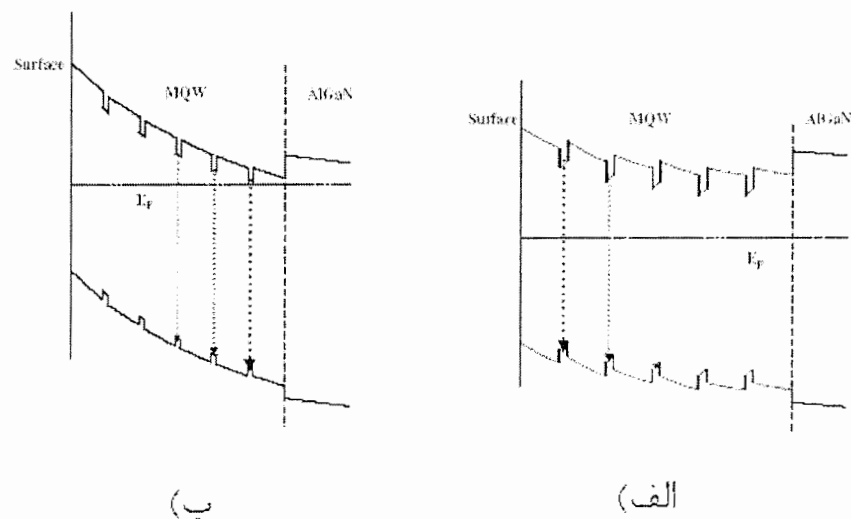
$$w_n^2 = \frac{2\Delta V \epsilon_0 \epsilon}{e^2 N_d} \quad (5-25)$$

که فرض شده است افت پتانسیل ناشی از میدان های داخلی در چاه های کوانتومی صرف نظر شود. در حالتی که $N_d = 10^{20} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ باشد، با جایگذاری مقادیر عددی ثابت، $w_n = 4/5 \text{ nm}$ به دست می آید و برای $N_d = 10^{18} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ ، $w_n = 45 \text{ nm}$ خواهد شد. این بدین معنی است که در آلاینش

های خیلی بالا فقط یک یا دو چاه اول از چاه های کوانتومی $\text{GaN}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ تحت تاثیر این میدان قرار می گیرند و در آرایش های پایین تمامی ناحیه فعال از بالا تا پایین تحت تاثیر این میدان قرار گرفته و در نتیجه از چاه های متفاوت گسیل های متفاوتی خواهیم دید. ماکزیمم میدان الکتریکی تهی در سطح خارجی نمونه توسط رابطه زیر به دست می آید:

$$E_{\max} = \frac{eN_d w_n}{\epsilon_0 \epsilon} \quad (۲۶-۵)$$

که با جایگذاری مقادیر عددی پارامترها برای نمونه با آرایش $(10^{20} \text{ cm}^{-3})$ ، $E_{\max} = 8 (MV/cm)$ به دست می آید در حالی که برای نمونه با آرایش $(10^{18} \text{ cm}^{-3})$ ، $E_{\max} = 0.8 (MV/cm)$ خواهد شد. باید توجه کنیم که در آرایش های پایین، که شدت میدان تهی کم است، این شدت در برابر شدت میدان های قطبشی داخلی چاه های کوانتومی که در بخش قبل محاسبه شده اند بسیار بیشتر است. در شکل ۵-۱۳ طرح شماتیکی از سطح مقطع عرضی پتانسیل برای دو نمونه از این نوع چاه های پتانسیل نشان داده شده است. همان طور که در شکل نشان داده شده در آرایش های زیاد به علت شدت زیاد میدان های تهی و تخلیه الکترون ها به لایه های درونی تر چاه های اولیه در ساختارهای MQW غیر فعال شده و گسیل از آنها نخواهیم دید در حالی که در نمونه با آرایش پایین گسیل از چاه های اولیه دیده می شود.



شکل ۵-۱۳: (الف) شکل سطح مقطع عرضی پتانسیل برای نمونه با آرایش سیلیکونی پایین $(10^{18} \text{ cm}^{-3})$ (ب) شکل متناظر با قسمت الف برای نمونه با آرایش سیلیکونی متوسط $(10^{19} \text{ cm}^{-3})$ که در آن به وضوح اثر میدان تهی در غیر فعال کردن چاه های بیرونی تر نشان داده شده است.

۵-۸- اثر حامل های آزاد (حامل های آلایشی و تزریقیⁱ و نوری) در فرآیند های باز ترکیب و استتار میدان های قطبشی داخلی در چاههای کوانتومی نیتروژندار

هدف اصلی در آلاییدن نیمه هادی ها تغییر در چگالی حامل های آزاد نیمه هادی به صورت کنترل شده می باشد. در حقیقت با این کار بسیاری از خواص فیزیکی، از جمله رسانندگی الکتریکی، در ماده مورد مطالعه را تحت کنترل خود در می آوریم. در این پروژه از اتم های Si برای آلایش نمونه ها استفاده شده است. اتم های سیلیکون به دلیل قابلیت حل شوندگی زیاد در GaN، در حدود 10^{20} cm^{-3} ، و همچنین در دسترس بودن و قیمت پایین، ماده مناسبی برای آلایش نمونه ها می باشد. در ادامه نشان می دهیم که میدان های قطبشی توسط حامل های آزاد می توانند استتار شوند. این حامل ها می تواند، حامل های ذاتی نمونه مثل حامل های نوری و یا حامل های تزریقی باشد یا از اتم های آلایشی که الکترونهای آنها به داخل چاه های کوانتومی سرازیر شده اند، نشأت گرفته باشد. این موضوع در این بخش به صورت تئوری بررسی می شود و در فصل بعد این موضوع را در مورد نمونه های خودمان به طور تجربی اثبات می کنیم. برای اینکه اثر استتار بررسی شود معادله شرودینگر و پواسون بایستی به صورت خود سازگارⁱⁱ حل شوند [۲۱]. دو حالت می توان در نظر گرفت اولی توزیع حامل های غیر تعادلی مرتبط با حامل های نوری (یا تزریقی) است، که ترازهای شبه فرمی الکترون و حفره برای یک چگالی بار دو بعدی (۲D) در چاه کوانتومی محاسبه شده و دومی توزیع تعادل گرمایی است که تراز فرمی به عنوان تابعی از چگالی آلایش با اعمال رابطه خنثایی بار محاسبه می شود [۲۲]. معادله پواسون عبارتست از:

$$\frac{d}{dz} \left[\epsilon(z) \frac{dV(z)}{dz} + P(z) \right] = -q\rho(z) \quad (۲۷-۵)$$

که z محور رشد می باشد و قطبش کل $P(z)$ ، توسط مجموع قطبش پیزوالکتریک $P^{(Pz)}$ و خود به خودی، $P^{(Sp)}$ ، یعنی $P_{tot}(z) = P^{(Sp)}(z) + P^{(Pz)}(z)$ بدست می آید. $\rho(z)$ در این رابطه عبارت است از:

$$\rho(z) = P(z) + N_D^+(z) - n(z) - N_A^-(z) \quad (۲۸-۵)$$

ⁱ Injected carrier

ⁱⁱ Self consistent

۵-۸- اثر حامل های آزاد (حامل های آلایشی و تزریقیⁱ و نوری) در فرآیند های باز ترکیب و استتار میدان های قطبشی داخلی در چاههای کوانتومی نیتروژندار

هدف اصلی در آلاییدن نیمه هادی ها تغییر در چگالی حامل های آزاد نیمه هادی به صورت کنترل شده می باشد. در حقیقت با این کار بسیاری از خواص فیزیکی، از جمله رسانندگی الکتریکی، در ماده مورد مطالعه را تحت کنترل خود در می آوریم. در این پروژه از اتم های Si برای آلایش نمونه ها استفاده شده است. اتم های سیلیکون به دلیل قابلیت حل شونده زیاد در GaN، در حدود 10^{20} cm^{-3} ، و همچنین در دسترس بودن و قیمت پایین، ماده مناسبی برای آلایش نمونه ها می باشد. در ادامه نشان می دهیم که میدان های قطبشی توسط حامل های آزاد می توانند استتار شوند. این حامل ها می تواند، حامل های ذاتی نمونه مثل حامل های نوری و یا حامل های تزریقی باشد یا از اتم های آلایشی که الکترونهای آنها به داخل چاه های کوانتومی سرازیر شده اند، نشأت گرفته باشد. این موضوع در این بخش به صورت تئوری بررسی می شود و در فصل بعد این موضوع را در مورد نمونه های خودمان به طور تجربی اثبات می کنیم. برای اینکه اثر استتار بررسی شود معادله شرودینگر و پواسون بایستی به صورت خود سازگارⁱⁱ حل شوند [۲۱]. دو حالت می توان در نظر گرفت اولی توزیع حامل های غیر تعادلی مرتبط با حامل های نوری (یا تزریقی) است، که ترازهای شبه فرمی الکترون و حفره برای یک چگالی بار دو بعدی (۲D) در چاه کوانتومی محاسبه شده و دومی توزیع تعادل گرمایی است که تراز فرمی به عنوان تابعی از چگالی آلایش با اعمال رابطه خنثایی بار محاسبه می شود [۲۲]. معادله پواسون عبارتست از:

$$\frac{d}{dz} \left[\epsilon(z) \frac{dV(z)}{dz} + P(z) \right] = -q\rho(z) \quad (27-5)$$

که z محور رشد می باشد و قطبش کل $P(z)$ ، توسط مجموع قطبش پیزوالکتریک $P^{(Pz)}$ و خود به خودی، $P^{(Sp)}$ ، یعنی $P_{tot}(z) = P^{(Sp)}(z) + P^{(Pz)}(z)$ بدست می آید. $\rho(z)$ در این رابطه عبارت است از:

$$\rho(z) = P(z) + N_D^+(z) - n(z) - N_A^-(z) \quad (28-5)$$

ⁱ Injected carrier

ⁱⁱ Self consistent

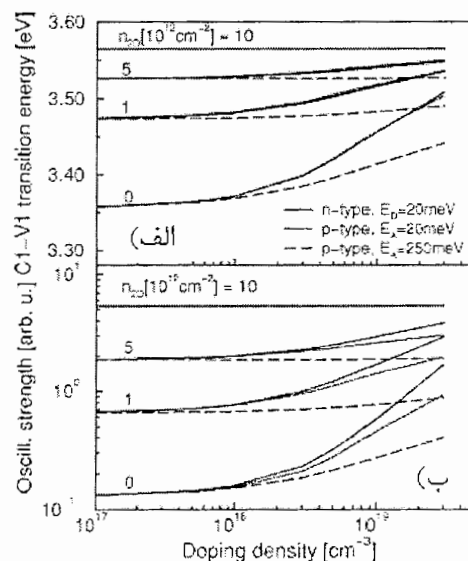
که $P(z)$ و $n(z)$ چگالی های الکترون و حفره می باشند و $N_D^+(z)$ و $N_A^-(z)$ ، چگالی های دهنده ها و پذیرنده ها می باشد. با حل معادله شرودینگر که برحسب تابعی از مختصات فضایی z می باشد می توان ترازهای الکترونی داخل چاه کوانتومی را بدست آورد. با تقریب جرم موثر بایستی معادله ویژه مقداری زیر را حل کنیم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m_i^*} \frac{d\psi_i(z)}{dz} \right] + V_c(z) \psi_i(z) = E_i \psi_i(z) \quad (29-5)$$

که برای جرم موثر بایستی مقادیر صحیح آنها را در نوار رسانش و ظرفیت جایگذاری کرد. از حل معادله (29-5) مقادیر ویژه E_i در نوار ظرفیت و هدایت و همچنین $\psi_i(z)$ ها بدست می آید. وقتی که معادلات پواسون و شرودینگر به طور خودسازگار حل شوند، این امکان وجود دارد که قدرت نوسانگر^۱ را در گذارهای اپتیکی بین نواری بدست آوریم. این محاسبات به طور کامل انجام شده و در مراجع [23-24] گردآوری شده است. محاسباتی که با روش بستگی قوی خودسازگار انجام شده [25] نشان می دهد که آلایدن سدها می تواند میدان های قطبشی داخلی ماکروسکوپی موجود در چاه های کوانتومی نیتروژندار را استتار کند؛ و در نتیجه پیک انرژی فوتولومینسانس را به سمت انرژی های بالاتر (آبی) شیفست دهد. در حقیقت استتار توسط آلایش باعث افزایش همپوشانی توابع موج الکترونها و حفره ها شده و احتمال گذار تابشی را بالا می برد. با افزایش احتمال بازترکیب الکترون و حفره طول عمر بازترکیب تابشی کاهش یافته و کاهش در طول عمر تابشی بازترکیب ها، افزایش در شدت گسیلی از چاه های کوانتومی نیتروژندار را موجب می شود. در شکل ۵-۱۴ این نتایج برای یک چاه کوانتومی چندگانه از جنس $\text{GaN}/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ شبیه سازی و رسم شده است [25]. در این شکل انرژی گذار اولین تراز (جدایی بین اولین تراز کوانتیده رسانش C_1) و اولین تراز کوانتیده ظرفیت (V_1) و قدرت نوسانگر $C_1 - V_1$ (که متناسب با احتمال گذار تابشی ترازهای $C_1 - V_1$ می باشد) بر حسب چگالی حامل های آلایشی مختلف و چگالی حامل های تزریقی (n_{2D}) متفاوت رسم شده است. همانطوری که از شکل ۵-۱۴ واضح است وقتی که چگالی حامل های تزریقی صفر می باشد ($n_{2D} = 0$) حامل های ناشی از اتم های آلاینه موجود در سد (که به ناحیه چاه سرازیر شده اند) میدان های قطبشی داخلی را تا حدی استتار می کنند. برای آلایش های نوع n و p ، انرژی

^۱ Oscillator strength

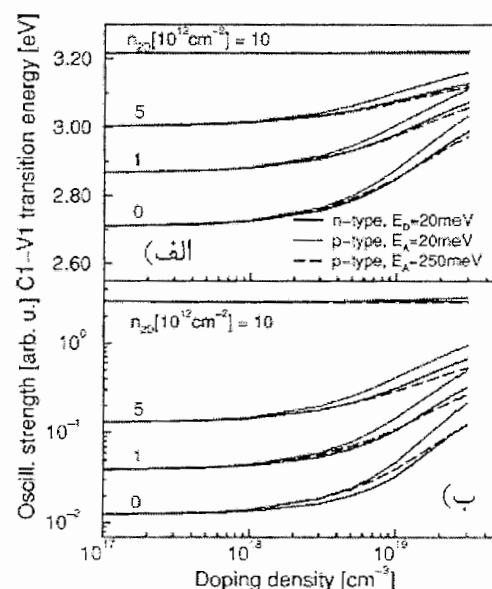
گذار تراز پایه وقتی که آرایش از مقدار $(\text{cm}^{-3}) 10^{17}$ تا $(\text{cm}^{-3}) 3 \times 10^{19}$ افزایش پیدا می کند، شیفی به اندازه ۱۵۰ meV به سمت آبی پیدا می کند. پذیرنده های عمیق^۱ همانطوری که از شکل ۵-۱۴ مشخص است، در استتار میدان های داخلی خیلی کمتر موثر هستند و شیفی به اندازه ۸۰ meV به سمت آبی در گذار تراز پایه این ساختار به وجود می آورد. این بدین علت است که آلاینده های با انرژی بستگی بیشتر، حامل آزاد کمتری را در چاه های کوانتومی تولید خواهند کرد و این به نوبه خود به معنای استتار کمتر می باشد. در ضمن افزایش چگالی حامل های آزاد تزریقی (n_{2D}) میزان شیفی به سمت آبی، که با افزایش چگالی آرایش در سدها از $(\text{cm}^{-3}) 10^{17}$ تا $(\text{cm}^{-3}) 3 \times 10^{19}$ در انرژی گذار پایه دیده می شود، را کاهش می دهد که علت آن این است که خود این حامل های تزریقی بخشی از میدان را استتار می کنند. قدرت نوسانگر که در شکل ۵-۱۴ ب نشان داده شده است، وقتی که مقدار آرایش از $(\text{cm}^{-3}) 10^{17}$ به $(\text{cm}^{-3}) 3 \times 10^{19}$ افزایش می یابد در غیاب حامل های تزریقی، به اندازه یک مرتبه بزرگی افزایش می یابد؛ همانطور که ذکر شد این بدین معنی است که استتار موثر میدان ها باعث افزایش همپوشانی توابع موج الکترون وحفره و افزایش بازدهی نوری سیستم می شود.



شکل ۵-۱۴: الف) انرژی گسیلی تراز پایه و ب) قدرت نوسانگر، در چاه های کوانتومی چندگانه $\text{GaN}/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ برحسب چگالی های آلاشی n, p در چگالی های متفاوت از حامل های آزاد تزریقی [۲۵].

^۱ Deep acceptor

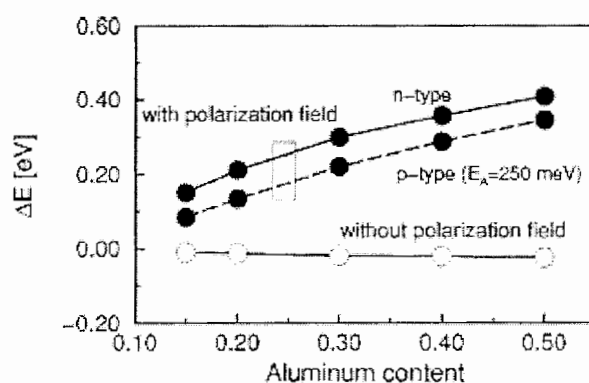
افزایش در احتمال گذار تابشی در مورد آرایش های نوع p سطحی نسبت به آرایش نوع n کمتر است؛ و این بخاطر انفصال نواری متفاوت برای الکترون ها و حفره ها در ساختار نواری و چگالی حالت های در دسترس متفاوت برای آرایش های نوع n و p سطحی می باشد. این موضوع در صنعت (مثلاً در طراحی لیزرها) از اهمیت قابل ملاحظه ای برخوردار است. به عنوان مثال همانگونه که از شکل ۵-۱۴-ب بر می آید احتمال باز ترکیب تابشی در آرایش $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{19} \times 3$ و چگالی حامل تزریقی $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{12} \times 5$ با حالتی که در آن هیچ آرایشی در نمونه وجود ندارد و $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{12}$ می باشد، برابر است. بنابراین با اضافه کردن مقدار آرایش در سدها می توان جریان آستانه یک لیزر را تا حد زیادی کاهش داد و این از لحاظ اقتصادی کاملاً مهم می باشد. در شکل ۵-۱۵ نیز همانند شکل ۵-۱۴ وابستگی انرژی گذار $C_1 - V_1$ و احتمال گذار تابشی در چاه کوانتومی چندگانه، GaN/In_{0.2}Ga_{0.8}N نشان داده شده است.



شکل ۵-۱۵: الف) انرژی گسیلی تراز پایه و ب) قدرت نوسانگر، در چاه های کوانتومی چندگانه GaN/In_{0.2}Ga_{0.8}N برحسب چگالی های آرایشی p ، n در چگالی های متفاوت از حامل های آزاد تزریقی [۲۵].

همان گونه که از شکل نمایان است اثر میدان های قطبشی توسط حامل ها (تزریقی و آرایشی) در این نمونه نسبت به نمونه GaN/Al_{0.15}Ga_{0.85}N نمایان تر و بیشتر می باشد. مقدار شیفست به آبی در مورد این نمونه به اندازه ۲۸۰ meV است که به طور قابل ملاحظه ای از نمونه بررسی شده

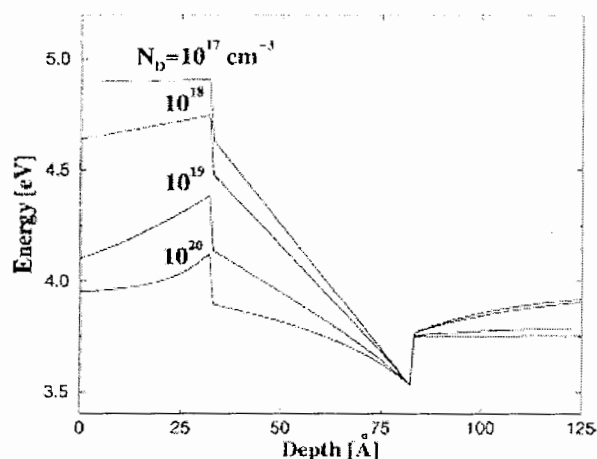
GaN/Al_{0.15}Ga_{0.85}N بیشتر است. بازدهی بیشتر استتار در نمونه GaN/In_{0.2}Ga_{0.8}N توسط حامل های آرایش های و تزریقی، به این علت است که میدان های قطبشی در این نمونه از نمونه قبلی قویتر است (بار قطبشی در سطح مشترک ساختار GaN/In_{0.2}Ga_{0.8}N حدود $0.3 \text{ (C/m}^2\text{)}$ است در حالیکه برای ساختار GaN/Al_{0.15}Ga_{0.85}N، حدود $0.13 \text{ (C/m}^2\text{)}$ می باشد.) [۲۵]. همچنین میزان شیفیت به آبی در انرژی گذار $C_1 - V_1$ به مقدار درصد مولی Al در ساختارها بستگی دارد. این موضوع در شکل ۱۶-۵ نشان داده شده است. میزان شیفیت به آبی در هر درصد مولی از Al وقتی که چگالی حامل های آایشی از $10^{17} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ تا $3 \times 10^{19} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ تغییر می کند، در ساختار GaN/Al_xGa_(1-x)N بر حسب درصد مولی Al محاسبه شده و رسم شده است [۲۵]. از روی شکل کاملاً واضح است که با افزایش درصد Al چون میدان های قطبشی افزایش می یابند میزان این شیفیت به سمت آبی بیشتر می شود.



شکل ۱۶-۵: تغییرات در شیفیت انرژی گذار $C_1 - V_1$ بر حسب درصدهای مولی مختلف Al در MQW، GaN/Al_xGa_(1-x)N؛ وقتی که چگالی حامل های آایشی از $10^{17} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ تا $3 \times 10^{19} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ تغییر می کند [۲۵].

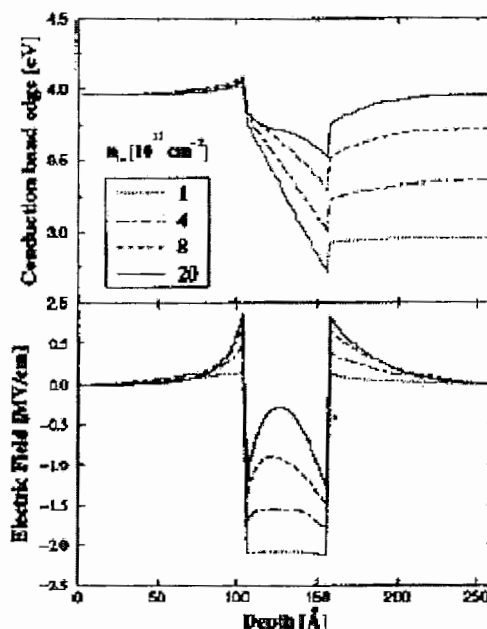
همانگونه که پیشتر در همین بخش ذکر شد، حامل های تزریقی (یا نوری) این قابلیت را دارند که تا حدی میدان های قطبشی داخلی را استتار کنند. ولی عملاً استفاده از این نوع حامل ها برای این منظور در قطعات اپتوالکترونیکی به دلایل زیر به صرفه و عقلانی نیست. اول اینکه استتار توسط این نوع از حامل ها موقتی است. یعنی اینکه وقتی جریان تزریقی (در مورد حامل های تزریقی) یا تابش نور (در مورد حامل های نوری) به ناحیه فعال سیستم قطع شود، چون حامل ها با گذشت زمان کم می شوند لذا استتار میدان ها توسط این حامل ها نیز کاهش یافته و کم کم از بین می رود. دوم اینکه چون جریان الکتریکی در طی زمان صد در صد ثابت نیست و افت و خیزهایی از خود نشان می دهد،

لذا خمیدگی ته چاه ها با زمان تغییر می کند و انرژی گسیلی از نمونه هر لحظه تغییر می کند که موجب پهن شدگی در پیک گسیلی از نمونه می گردد. این موضوع در لیزرهای نیمرسانا نور لیزر را از حالت تکفامی خارج می سازد. برای اینکه اثر حامل های آلایشی را روی نوار رسانش نشان دهیم، سطح مقطع عرضی نوار رسانش را در یک چاه کوانتومی تنها $\text{GaN}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ را (با پهنای چاه $50 \text{ \AA}$ که در ناحیه سد آلایش یافته است) که با روش بستگی قوی محاسبه شده و شبیه سازی گشته در شکل ۵-۱۷ نشان داده ایم [۴]. میدان های قطبشی سمت چپ نوار رسانش را نسبت به انرژی سطح فرمی بالاتر می برند و در نتیجه الکترون های ناشی از اتم های آلایشی در سد سمت چپی به داخل چاه های کوانتومی سرازیر می شوند و در پشت خود یک میدان تهی بجای می گذارند. در نتیجه سرازیر شدن الکترون ها به داخل چاه کوانتومی میدان های قطبشی درون چاه کم کم استتار می شوند و این استتار در آلایش های بالاتر از 10^{19} cm^{-3} کاملاً مشهود است. وجود میدان تهی باعث می شود که خمش زیادی در طرف سد سمت چپی به وجود آید. در حالت کلی مشخص نیست که بتوانیم در سدها برای استتار کردن میدان های قطبشی هر اندازه ای که بخواهیم، آلایش ایجاد کنیم؛ ولی می توانیم با استفاده از ترکیبی آلایش و حامل های نوری یا تزریقی میدان ها را تا حد قابل ملاحظه ای استتار کنیم و خمش موجود در ساختار نواری را بهبود بخشیده و به حالت مسطح بدون میدان برگردانیم.



شکل ۵-۱۷: شبیه سازی سطح مقطع عرضی نوار رسانش در یک چاه کوانتومی تنها $\text{GaN}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ با پهنای چاه $50 \text{ \AA}$ که در ناحیه سد آلایش یافته است (با روش بستگی قوی محاسبه شده است) [۴].

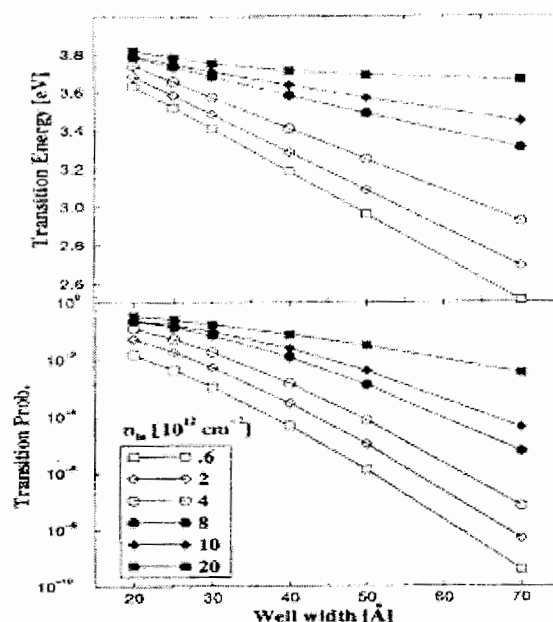
اگر در ساختار هیچ حامل آلاشی وجود نداشته باشد و فقط حامل های نوری وجود داشته باشند (یعنی حامل های که در اثر تابش نور منبع نور به ناحیه فعال ساختار به وجود می آیند) می توان اثر این حامل ها را در استتار کردن میدان های قطبشی داخلی بررسی کرد. در توان های برانگیختگی به اندازه کافی بالا، چگالی حامل های نوری به اندازه ای خواهد شد که قادر به استتار کردن میدان های قطبشی داخلی در ساختار خواهند بود (میدانی که این نوع از حامل ها در اثر جدایی فضایی به وجود آمده بین الکترون و حفره تولید می کنند در خلاف جهت میدان های قطبشی می باشد). همانگونه در شکل ۵-۱۸ نشان داده شده است، محاسبات خودسازگار و شبیه سازی لبه نوار رسانش برای یک چاه کوانتومی GaN/AlGaN به ضخامت $50 \text{ \AA}$ نشان می دهد که با افزایش توان برانگیختگی منبع نور تحریکی و در نتیجه افزایش چگالی حامل های آزاد از 10^{12} cm^{-2} تا $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ به طور موثری میدان های داخلی توسط این حامل ها استتار می شوند [۴].



شکل ۵-۱۸: محاسبات خودسازگار و شبیه سازی لبه نوار رسانش برای یک چاه کوانتومی GaN/AlGaN به ضخامت $50 \text{ \AA}$ در چگالی حامل های آزاد نوری مختلف [۴].

همانطوری که در شکل ۵-۱۹ نشان داده شده است در یک پهنای ثابت از چاه کوانتومی مورد بحث، شیفت به سمت قرمز در انرژی گذار تراز پایه با افزایش چگالی حامل های نوری کاهش می یابد

و در چگالی زیاد حامل ها این شیفت تقریباً مستقل از پهنای چاه می شود. احتمال گذار تابشی نیز با افزایش چگالی حامل های نوری به اندازه چند مرتبه بزرگی افزایش می یابد. در هر صورت حامل ها (الکترون و حفره ها) تا حدی از یکدیگر جداگشته اند که حتی در چگالی زیاد حامل ها، احتمال گذار تابشی هرگز به یک میل نمی کند و این یکی از دلایل بازدهی کوانتومی پایین مشاهده شده در قطعات حاوی چاه های کوانتومی چندگانه نیتروژندار می باشد. در خاتمه باید یادآور شویم که برای حصول به چگالی حامل های نوری از مرتبه $(cm^{-2}) \times 10^{13}$ برای هر چاه کوانتومی (KW/cm^2) ۱۰-۲۰ توان اپتیکی لازم است [۴].



شکل ۵-۱۹: نمودار مقدار شیفت به سمت قرمز در انرژی تراز پایه و احتمال این گذار تابشی در ضخامت های مختلف از چاه کوانتومی GaN/AlGaN [۴]

- [١] B. Monemar; H. Haratizadeh; P. P. Poskov; G. Pozina; P. O. Holtz; J. P. Bergman; S. Kamiyama; M. Iwaya; H. Amano; I. Akasaki; J. Phys. Stat. Sol. (b) **237**, No.1, P.353-364 (2003).
- [٢] O. Ambacher; J. Majewski; C. Miskys; A. Link; M. Hermann; M. Eickhoff; M. Stutzmann; F. Bernardini; V. Fiorentini; V. Tilak; B. Schaff and L. F. Eastman; J. Phys. Condens. Matter **14** (2002).
- [٣] Nye J F 1985 Physcal Properties of Crystals; Their Representation by Tensors and Matrices(Oxford Clarendon).
- [٤] V. Fiorentini; F. Bernardini; F. Della seala; A. Di Carlo; P. Lugli; J. Phys. Rev. B **60**, No. 12 ; P.8849, (1999).
- [٥] F. Bernardini; V. Fiorentini; J. Phys. Rev. B **64** (2001).
- [٦] F. Bernardini, V. Fiorentini, and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **63**, 193201 (2001).
- [٧] F. Bernardini and V. Fiorentini, Phys. Rev. B **64**, 085207 (2001).
- [٨] F. Bernadini, V. Fiorentini, and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **56**, R10024 (1997).
- [٩] S. Nakamura and G. Fasol; *The Blue Laser Diode: GaN Based Light Emitters and Lasers* (Springer-Verlag, Berlin, 1997).
- [١٠] O. Ambacher; B. Foutz; J. Smart; J. R. Shealy; N. G. Weimann; K. Chu; M. Murphy; A. J. Sierakowski; W. J. Schaff; L. F. Eastman; R. Dimitrov; A. Mitchell and M. Stutzmann; J.pl. Phys. **87**, 334 (2000).
- [١١] J. H. Davies; *The Physics of Low-Dimentional Semiconductors, An Introduction*; Cambridge University Press (1998).
- [١٢] *Low-Dimentional Nitride Semiconductors*, edited by B. Gil, Oxford University Press, pp. 237(2002).
- [١٣] B. Monemar; G. Pozina; Prog. Quantum Electron. **24**, 239 (2000).
- [١٤] H. Haratizadeh; B. Monemar; P. P. Paskov; P. O. Holtz; G. Pozina; S. Kamiyama; M. Iwaya; H. Amano and I. Akasaki; J. Phys. Stat. Sol. (b) **241**, No.5, 1124 -1133 (2004).
- [١٥] G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang, and L. Esaki, *Phys. Rev. B*, Vol. **28**, No. **6**, 3243 (1983).
- [١٦] J. Singh, *Appl. Phys. Lett.* **64** (20), 2694, (1994).
- [١٧] R. Cingolani, A. Botcharev, H. Tang, H. Markoc, G. Traetta, G. Coli, M. Lomascolo, A. Di Carlo, F. Della Sala, and P. Lugli, *Phys. Rev. B* **61**, 2711 (2000).
- [١٨] H. Morkoc; *Nitride Semiconductors and Devises*; ed. By R. Hull; R. M. Osgood; Jr. H. Sakaki, and A. Zunger; Springer-Verlage, P. 80 (1999).

- [19] B. Monemar, P. P. Paskov, G. Pozina, J. P. Bergman, S. Kamiyama, M. Iwaya, H. Amano, and I. Akasaki, *Phys. stat. sol. (a)* **192**, 21 (2002).
- [20] O. Mayrock, H. J. Wunsche, and F. Henneberger, *Phys. Rev. B* **62**, 16870 (2000).
- [21] A. Di Carlo; S. Pescetelli; M. Paciotti; P. Lugli; M. Graf; *Solid State Commun.* **98**, 803 (1996); A. Di Carlo, in Tightbinding Approach to Computational Materials Science., edited by P. E. A. Turchi; A. Gonis and L. Colombo, MRS Symposia Proceeding No. 491, Materials Reserch Society, Pittsburgh, P. 389, (1998).
- [22] R. Dingle; H. L. Stormer; A. C. Gossard and W. Wiegmann; *J. Appl. Phys. Lett.* **33**, 665 (1978).
- [23] J.-M. Jancu; R. Scholz; F. Beltram and F. Bassani; *J. Phys. Rev. B* **57**, 6493 (1998).
- [24] F. Della Sala; A. Di Carlo; P. Lugli; F. Bernardini; V. Fiorentini; R. Scholz and J.-M. Jancu; *J. Appl. Phys. Lett.* **74**, 2002 (1999).
- [25] F. Della Sala; A. Di Carlo; P. Lugli; V. Fiorentini and F. Bernardini; *J. Appl. Phys. Lett.* **76**, 3950 (2000).

فصل ۴:

تحلیل نتایج بدست آمده و بحث در مورد نتایج فیزیکی

- مقدمه
- تأیید تجربی بر استتار میدان های قطبشی داخلی MQW های $\text{GaN}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ توسط آرایش سیلیکونی با استفاده از طیف فوتولومینسانس معمولی
- تأیید تجربی بر افزایش راندمان نوری ناشی از آرایش سیلیکونی در MQW های $\text{GaN}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$
- تعیین تجربی نوع مکانیسم باز ترکیب نوری در آرایش های سیلیکونی مختلف در چاه های کوانتومی GaN/AlGAN
- بررسی تجربی اثر آرایش سیلیکونی بر روی مکانیسم باز ترکیب نوری و غیرنوری در MQW های $\text{GaN}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$
- تعیین تجربی انرژی جایگزیدگی به کمک تغییرات دمایی منحنی فوتولومینسانس
- رقابت حامل های نوری و دائمی در استتار میدان های قطبشی در چاه های کوانتومی $\text{GaN}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$
- مطالعه وابستگی نوری لومینسانس نمونه ها در اثر تغییر شدت نور تحریکی

۶-۱- مقدمه

همانگونه که در چکیده پایان نامه اشاره شده است، مطالعه اپتیکی انجام شده به روی نمونه ها به روش فوتولومینسانس و بخشی نیز به روش فوتولومینسانس وابسته به زمان در شرایط فیزیکی متفاوت از نظر دمای نمونه (از دمای هلیوم مایع تا دمای اتاق)، شدت نور لیزر فرودی و همچنین میزان آلاینش سیلیکونی به انجام رسیده است. در آزمایش های فوتولومینسانس معمولی نمونه ها در کرایستات قرار داشتند و نمونه ها با هارمونیک چهارم از یک لیزر (Nd - Vanadate) که دارای طول موج ۲۶۶ nm است، برانگیخته شده اند. سیگنال فوتولومینسانس بوسیله یک توری تک رنگ کننده، پراکنده و بوسیله یک دوربین CCD در دمای نیتروژن مایع آشکار سازی شده است. برای آزمایش های TRPL، از هارمونیک سوم یک لیزر پالسی Ti - Sapphire به عنوان منبع تحریک استفاده شده است. توان لیزر مورد استفاده ۲۰mW و قطر نور آن در حدود ۱۰۰ میکرومتر است. فرکانس لیزر مورد استفاده ۲۵۰KHz بوده و برای آشکار سازی سیگنال های وابسته به زمان فوتولومینسانس از سینکرواسکن هاماماتسو (Hamamatsu) با دقت بیشتر از ۱۰ پیکوثانیه استفاده شده است.

لیزر پالسی مورد استفاده در آزمایش های TRPL در مدت زمان کوتاهی در حدود ۲۰۰ps روی نمونه اعمال شده و باعث برانگیختگی الکترون ها می گردد. ما برای تحلیل داده های خود از نرم افزار Origin و Peak fit استفاده کردیم. نرم افزار های بکار رفته توانمندی بسیار خوبی در رسم داده های ماتریسی دارد. این نرم افزار ها قابلیت های زیادی برای رسم داده ها و همچنین مشخص کردن قله نمودار و فیت کردن توابع خطی و غیرخطی بر روی نمودارهای رسم شده را دارند. اطلاعات خام ذخیره شده در اندازه گیری با سیستم های فوتولومینسانس و فوتولومینسانس وابسته به زمان به صورت کدهای ASCII است که به

کمک برنامه فوق اطلاعات مورد نیاز را از آنها می توان استخراج نمود. همانطور که اشاره شد این نرم افزارها ابزار مناسب برای فیت کردن داده های تجربی برحسب توابع مختلف ریاضی است که متناسب با مفاهیم فیزیکی داده های تجربی می توان از توابع گاوسی، لورنتسی و یا هر تابع دلخواه دیگری استفاده نمود. از طرفی این برنامه ها دارای ورودی و خروجی های مناسبی به برنامه های مختلفی از جمله Word ، Excel ، Matlab می باشند. ما در این فصل به طور کامل نتایج حاصل از اندازه گیری های مختلف روی نمونه هایی که توسط استاد راهنما انجام گرفته را مورد بحث و بررسی قرار می دهیم.

۲-۶- تأیید تجربی بر استتار میدانهای قطبشی داخلی MQW های $\text{GaN}/\text{Al}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{N}$ توسط

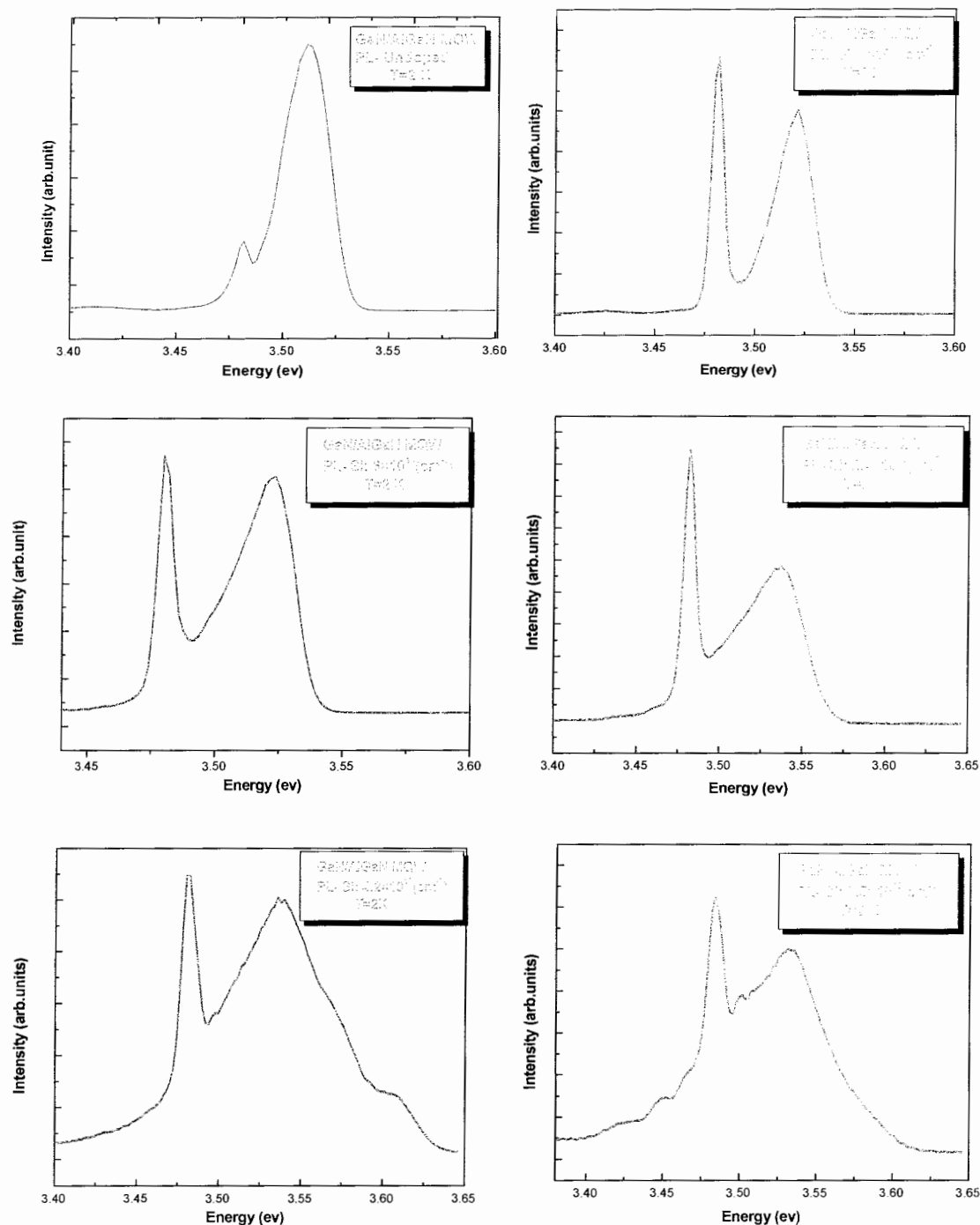
آلایش سیلیکونی با استفاده از طیف فوتولومینسانس معمولی

در شکل ۱-۶ طیف فوتولومینسانس (PL) حاصل از نمونه ها در دمای ۲ کلوین به ترتیب رسم شده است. همانطور که پیشتر ذکر شد تمامی این نمونه ها (به جز نمونه اول) دارای آلایش سیلیکونی می باشند. با مشاهده طیف PL این نمونه ها، یک نکته مهم درباره آنها فهمیده می شود و آن این است که پیک فوتولومینسانس حاصل از بازترکیب حامل ها در چاه های کوانتومی نسبت به پیک فوتولومینسانس حاصل از لایه ضخیم بافر GaN ($2/48 \text{ eV}$ در دمای ۲K) شیفی به سمت انرژی های بالاتر (آبی) از خود نشان می دهد که برای تمام نمونه ها این مسئله به وضوح از روی شکل پیداست (بایستی اشاره کنیم نور لیزر که برای تحریک ناحیه فعال به کار می رود از ناحیه فعال عبور کرده و باعث تحریک حامل ها در لایه GaN بافر نیز می شود). دلیل این شیف به انرژی های بیشتر (آبی) وجود اثر محدودیت کوانتومی می باشد. همانطور که می دانیم حامل ها در چاه های کوانتومی در دو بعد محدود شده اند و این محدودیت باعث می شود که ترازهای انرژی نسبت به ته چاه شیفی به سمت بالا (انرژی های بالا) در مقایسه با نوارهای انرژی ماده مشابه با ساختار کپه ای داشته باشد. لذا اگر، مثلاً تراز اول را در این سیستمهای دو بعدی در نظر بگیریم، گسیل تابشی بدست آمده در حالت دوبعدی (چاه های کوانتومی) در انرژی های بیشتری نسبت به نیمه رسانای کپه ای در طیف PL ظهور پیدا خواهد کرد. در شکل ۱-۱ این موضوع به طور شماتیک نشان داده شده است. البته در چاه های کوانتومی مورد بررسی، اثر استتارک

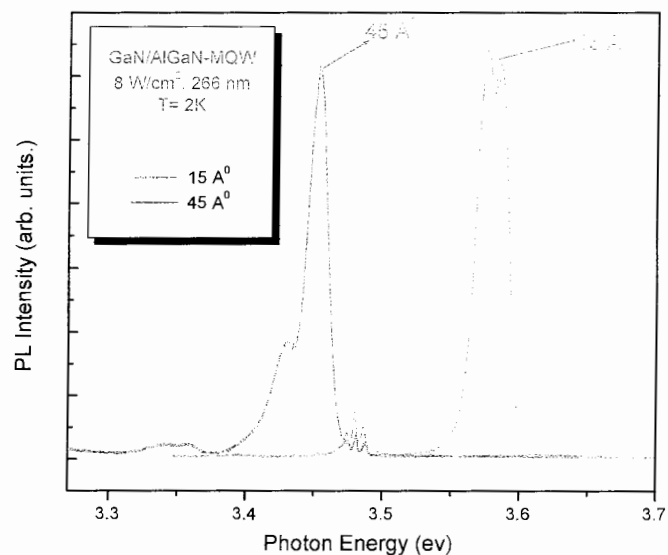
کوانتومی محدود نیز وجود دارد که تمایل دارد انرژی گسیلی از چاه ها را به سمت انرژی های کمتر (قرمز) شیف دهد ولی در این نمونه ها اثر محدودیت کوانتومی بر اثر استارک غلبه کرده و ما در نهایت شیفتی به سمت آبی در پیک PL حاصل از چاه ها نسبت به پیک حاصل از GaN کپه ای مشاهده می کنیم. در چاه های کوانتومی که پهنای چاه های آنها بیشتر از ضخامت بحرانی، $\hbar c$ است؛ اثر کوانتومی استارک بر اثر محدودیت غلبه کرده و پیک PL حاصل از چاه های کوانتومی نسبت به پیک PL حاصل از لایه GaN بافر به سمت قرمز شیفت پیدا می کند. در مورد چاه های کوانتومی GaN/AlGaIn این ضخامت حدود $40 \text{ \AA}$ است. لذا اگر طیف فوتولومینسانس نمونه ای با پهنای چاه بیشتر از $40 \text{ \AA}$ را داشته باشیم، انتظار داریم که پیک حاصل از QW ها نسبت به پیک حاصل از GaN بافر به سمت قرمز شیفت پیدا کند. البته بطور عملی این انتظار همانطور که از شکل ۶-۲ بدست آمده برآورده شده است. اگر طیف فوتولومینسانس نرمالیزه شده همه نمونه ها را که در دمای 2K بدست آمده در یک گراف ترسیم کنیم می بینیم که با افزایش آلایش سیلیکونی تا حد $(4/2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2})$ پیک تابش گسیلی از چاه های کوانتومی آلایش یافته نسبت به نمونه بدون آلایش شیفتی به سمت آبی از خود نشان می دهد (شکل ۶-۳ را ملاحظه کنید). در توجیه مشاهده این شیفت بایستی خاطر نشان کنیم که همانطوری که گفته شد در چاه های کوانتومی نیتروژندار میدان های قطبشی وجود دارند که باعث اثر کوانتومی استارک محدود می شوند. در حقیقت با افزایش آلایش Si نمونه ها و افزایش الکترونهای داخل چاه ها، میدان های قطبشی داخلی استتار شده و اثر کوانتومی استارک کاهش یافته و انرژی پیک فوتولومینسانس حاصل از چاه های کوانتومی نمونه های آلایش یافته نسبت به نمونه بدون آلایش به سمت آبی شیفت پیدا خواهد کرد. البته در آلایش هایی بیشتر از مقدار $(4/2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2})$ بعلت اثر دوباره نرمال سازی گاف انرژی^۱ (BGR)، پیک PL حاصل از چاه های کوانتومی نسبت به انرژی پیک مشاهده شده برای نمونه با آلایش $(4/2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2})$ شیفتی به سمت قرمز پیدا می کند. در شکل ۶-۴ تغییرات انرژی پیک فوتولومینسانس چاه های کوانتومی در نمونه

^۱ Band gap renormalization

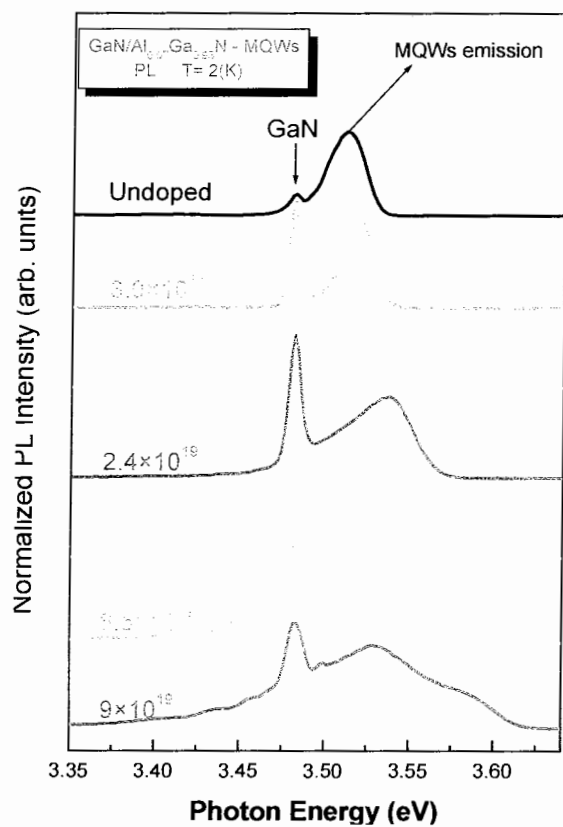
های معرفی شده برحسب آرایش های سیلیکونی متفاوت رسم شده است و بوضوح نقش آرایش سیلیکونی در استار میدان های پیزوالکتریک و خودبه خودی نشان داده شده است.



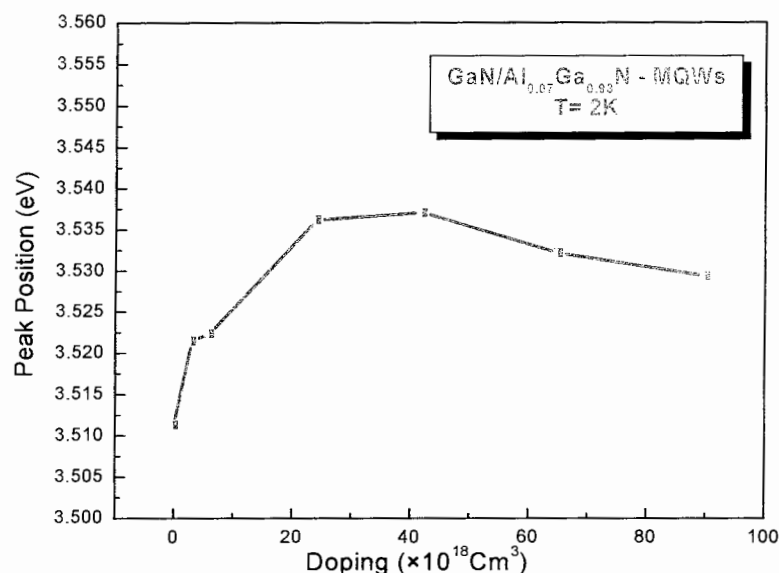
شکل ۶-۱: طیف PL حاصل از نمونه ها در دما ۲K (به شیفته به سمت آبی پیک QW نسبت به GaN که ای توجه کنید).



شکل ۶-۲: طیف PL حاصل از سه نمونه از چاه های GaN/AlGaN با پهنای چاه متفاوت در دمای ۲K (به محل قرارگیری پیک حاصل از چاه های کوانتومی و GaN که به ای در ضخامت های متفاوت دقت کنید).



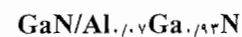
شکل ۶-۳: طیف فوتولومینسانس نرمالیزه شده تمام نمونه ها در دمای ۲K



شکل ۴-۶: نمودار تغییرات انرژی پیک فوتولومینسانس حاصل از چاه های کوانتومی GaN/AlGaN با افزایش آرایش سیلیکونی در سدهای AlGaN

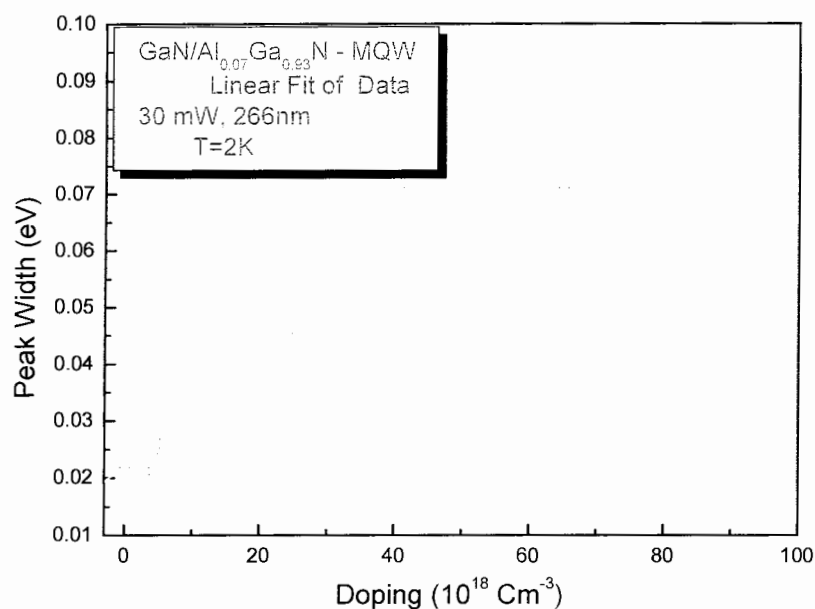
همانطور که از شکل ۳-۶ واضح است، شکل طیف PL در نمونه های آرایش یافته غیرمتقارن است و دارای دنباله طولانی تری در قسمت انرژی های کمتر می باشد. تحلیل دقیقی از علت مشاهده چنین رفتاری در طیف PL نمونه های آرایش یافته به علت اینکه احتمالاً طیف فوتولومینسانس آنها برهم نهی طیف های PL چاه های مختلف موجود در ناحیه فعال این نمونه ها می باشد در دسترس نیست و تمام تحلیل ها غیرقطعی هستند. همچنین با افزایش آرایش سیلیکونی این دنباله که در قسمت انرژی های پایین قرار دارد به سمت انرژی های کمتر حرکت می کند. یکی از دلایل اصلی مشاهده چنین رفتاری این است که با افزایش آرایش سیلیکونی به علت اینکه ترازهای دهنده زیر نوار رسانش بسیار زیاد و نزدیک به هم می شوند پدیده دوباره نرمال سازی گاف انرژی رخ می دهد و به این ترتیب با افزایش ترازهای انرژی به سمت پایین شیفต์ پیدا کرده و بدین ترتیب گسیل هایی در انرژی های پایینتر دیده می شود. و طیف PL در قسمت انرژی های پایین به سمت انرژی های کمتر شیفต์ پیدا می کند.

۳-۶- تأیید تجربی بر افزایش راندمان نوری ناشی از آلایش سیلیکونی در MQW های

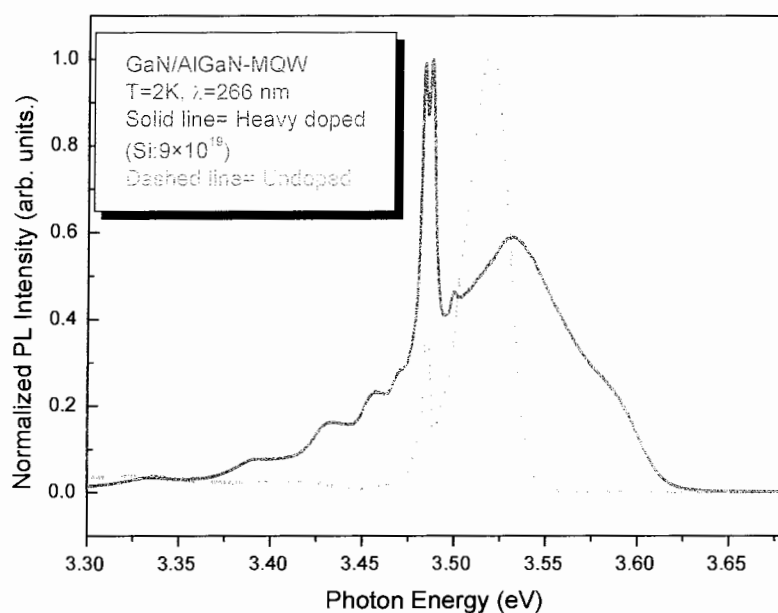


در این بخش به طور تجربی نشان می دهیم که افزایش آلایش سیلیکونی در چاه کوانتومی GaN/AlGa_{0.7}N بازدهی نوری آنها را افزایش خواهد داد. این موضوع در صنعت از اهمیت قابل توجه ای برخوردار است. همان گونه که از شکل ۳-۶ مشخص است پیک PL حاصل از چاه های کوانتومی با افزایش آلایش سیلیکونی پهن تر می شود. در شکل ۵-۶ نموداری که تغییرات پهنای پیک PL حاصل از QW ها (FWHM) را برحسب آلایش سیلیکونی نشان می دهد، نشان داده شده است. اولین دلیل این پهن شدگی در پیک QW وجود نقایص ساختاری فراوان در نمونه های آلایش یافته در مقایسه با نمونه های بدون آلایش می باشد. یکی دیگر از دلایل مهم مشاهده چنین پهن شدگی طیف PL چاه کوانتومی این است که چون نمونه های مورد بررسی در این مقاله Cap layer نداشته اند، لذا یک میدان تهی به علت وجود حالت های سطحی و تخلیه الکترونیهای لایه های سطحی به چاه های داخلی تر به وجود می آید. که برد این میدان تهی با افزایش آلایش کم شده ولی شدت میدان تهی افزایش می یابد (به بخش ۵-۷ مراجعه کنید). بدین ترتیب در نمونه هایی که آلایش سیلیکونی آنها زیاد است یکسری از چاه ها به دلیل شدت زیاد میدان غیر فعال شده و گسیلی از آنها نخواهیم دید و در نتیجه شدت میدان در چاه های متفاوت یک نمونه خاص با آلایش بالا با همدیگر تفاوت خواهند داشت، لذا اثر کوانتومی محدود استارک در چاه های مختلف یک نمونه با یکدیگر متفاوت خواهند بود و گسیل های متفاوتی از چاه های مختلف این نمونه ها در مقایسه با نمونه هایی با آلایش کمتر خواهیم داشت و لذا طیف PL که برهمنهی این طیف ها است پهن خواهد شد. از دلایل دیگر مشاهده چنین پهن شدگی، جذب غیر یکنواخت نور لیزر در چاه های مختلف و نیز غیر یکسان بودن پهنای چاه های مختلف یک نمونه می باشد. همانگونه که از شکل ۶-۶ نمایان است وجود آلایش سیلیکونی به نحو موثری بازده نوری نمونه ها را افزایش می دهد زیرا با افزایش آلایش سیلیکونی سطح زیر منحنی پیک PL حاصل از QW افزایش می یابد. در اثر حضور آلایش سیلیکونی میدان های قطبشی داخلی توسط الکترون های ناشی از آلایش به نحو موثرتری استتار شده و اثر کوانتومی محدود استارک کاهش می یابد. این موضوع باعث افزایش همپوشانی توابع موج

الکترون و حفره شده و این افزایش همپوشانی توابع موج الکترون و حفره به معنای افزایش راندمان نوری در چاه های کوانتومی GaN/AlGaN می باشد.



شکل ۵-۶: تغییرات پهنای پیک فوتولومینسانس حاصل از QW ها (FWHM) بر حسب چگالی آرایش

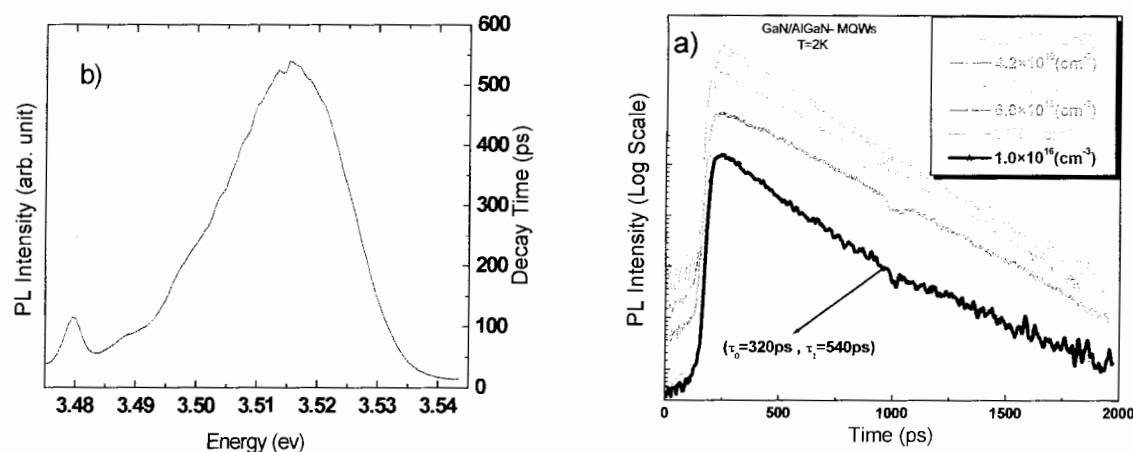


شکل ۶-۶: طیف فوتولومینسانس نمونه های با چگال آرایش متفاوت در دمای ۲K (به افزایش مساحت زیرمنحنی پیک PL حاصل از QW ها با افزایش سیلیکونی توجه کنید).

۴-۶- تعیین تجربی نوع مکانیسم باز ترکیب نوری در آلایش های سیلیکونی مختلف در چاه

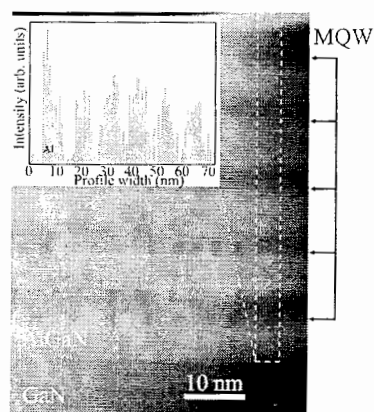
GaN/AlGaN های کوانتومی

با ثبت شدت فوتولومینسانس نمونه در مدت رهاسازی آن، می توان رفتار باز ترکیبی نمونه را مورد بررسی قرار داد. در حقیقت با مشاهده رفتار زمان واهلش پیک فوتولومینسانس حاصل از چاه های کوانتومی چندگانه می توان نوع مکانیسم باز ترکیب موجود در نمونه ها را حدس زد. با بررسی زمان واهلش نمونه ها می بینیم که منحنی زمان واهلش همه آنها به جز نمونه بدون آلایش تک نمایی هستند. غیر تک نمایی بودن تغییرات زمانی پیک طیف فوتولومینسانس در نمونه بدون آلایش دلیلی بر دو مرحله ای بودن فرآیند باز ترکیب در این نمونه می باشد. این موضوع در شکل ۶-۷ نشان داده شده است. همچنین در این شکل زمان واهلش در یکسری انرژی های مهم برای نمونه بدون آلایش نشان داده شده است. بایستی توضیح دهیم که در نیمه رساناهای نیتروژندار افت و خیزهای پتانسیل حتی در نمونه های با کیفیت عالی نیز قابل نظر کردن نیست و آشفتگی پتانسیل به خاطر میدان های قطبشی داخلی و افت و خیزهای سطحی، در رفتگی ها، ناخالصی ها و توزیع غیر یکنواخت مواد در لایه های سد و چاه همواره وجود دارد [۱]. توزیع غیر یکنواخت در سدهای AlGaN نمونه های ما توسط تصاویر TEM نیز تأیید شده است و در شکل ۶-۸ نشان داده شده است.



شکل ۶-۷: الف) نمودار تغییرات زمان واهلش پیک PL چاه های کوانتومی در آلایش های مختلف ب) نمودار تغییرات زمان واهلش در چند انرژی مهم برای نمونه بدون آلایش

این عدم یکنواختی در توزیع که در مرحله رشد به وجود می آید باعث به وجود آمدن افت و خیزهای پتانسیل در سطح مشترک می شود [۲]. در نمونه بدون آلاینش نیز به علت وجود چنین افت و خیزهای پتانسیل در ته چاه ها، حامل ها در این مراکز جایگزیده می شوند و مکانیسم بازترکیب اکسیتونی است. در حقیقت زمان واهلش از دو قسمت تشکیل می شود: بخش اول زمان لازم برای اینکه الکترون و حفره به حداقل انرژی برسند و دیگری زمان لازم برای انجام عمل بازترکیب، که ما از آنها بترتیب با عنوان زمان جایگزیدگیⁱ و زمان بازترکیبⁱⁱ یاد می کنیم. همین موضوع منجر به رفتار غیر نمایی زمان واهلش در نمونه بدون آلاینش می شود. با اضافه کردن آلاینش نوع n در سدها و در نتیجه افزایش تعداد الکترونهای آزاد در ناحیه چاه GaN به تدریج افت و خیزهای پتانسیل مربوط به الکترونها استتار شده و دیگر مسئله جایگزیدگی مطرح نیست. از طرف دیگر با افزایش آلاینش نیروی کولنی بین الکترون و حفره استتار شده و احتمال اینکه یک الکترون بتواند یک حفره را پیدا کند و تشکیل اکسیتون بدهد، خیلی کم می شود و اگر اکسیتونی تشکیل شود آنقدر ناپایدار است که سریع می شکند و مکانیسم بازترکیب در این نمونه ها بصورت الکترون آزاد و حفره جایگزیده خواهد بود.

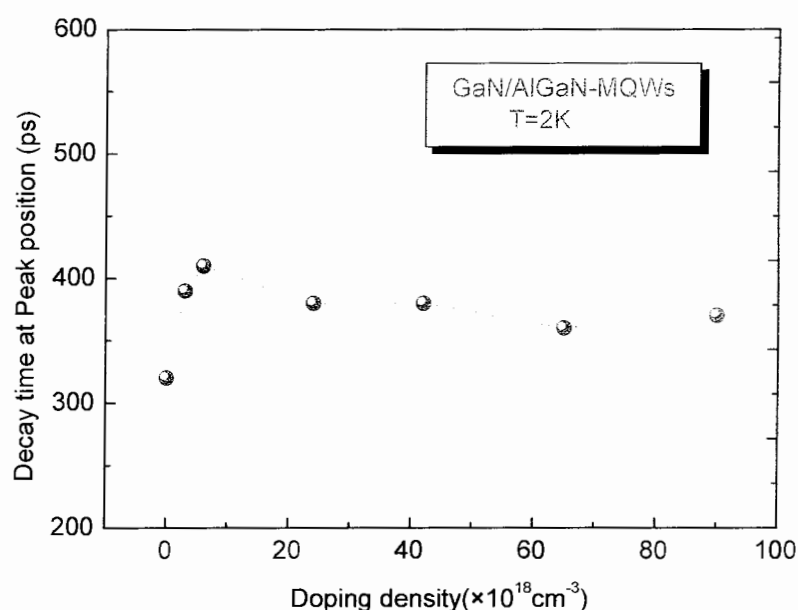


شکل ۶-۸: تصویر TEM نمونه

ⁱRelaxation time

ⁱⁱRecombination time

از آنجایی که تعداد حفره ها ثابت است و به علت کوچکی تابع موج حفره در AlGaIn (در حدود فاصله بین اتمهای Al است) [۳] همواره و براحتی حفره ها در افت و خیزهای پتانسیل در این نمونه ها جایگزیده هستند. در شکل ۶-۹ منحنی مقدار زمان واهلش مربوط به انرژی پیک PL همه نمونه ها برحسب چگالی آرایش رسم شده است. با اینکه انتظار داشتیم زمان واهلش با افزایش آرایش نوع n بدلیل در دسترس بودن تعداد زیاد الکترون برای بازترکیب و همچنین بدلیل از میان رفتن مسئله جایگزیدگی بخاطر استتار افت و خیزهای پتانسیل توسط الکترونهای آزاد، بتدریج کاهش یابد ولی می بینیم که زمان واهلش تقریباً ثابت است و علت آن همانطور که گفته شده جایگزیدگی حفره هاست و در حقیقت این شکل تائیدی بر جایگزیدگی حفره ها می باشد. این موضوع قبلاً توسط گالارتⁱ نیز پیش بینی شده بود [۴].



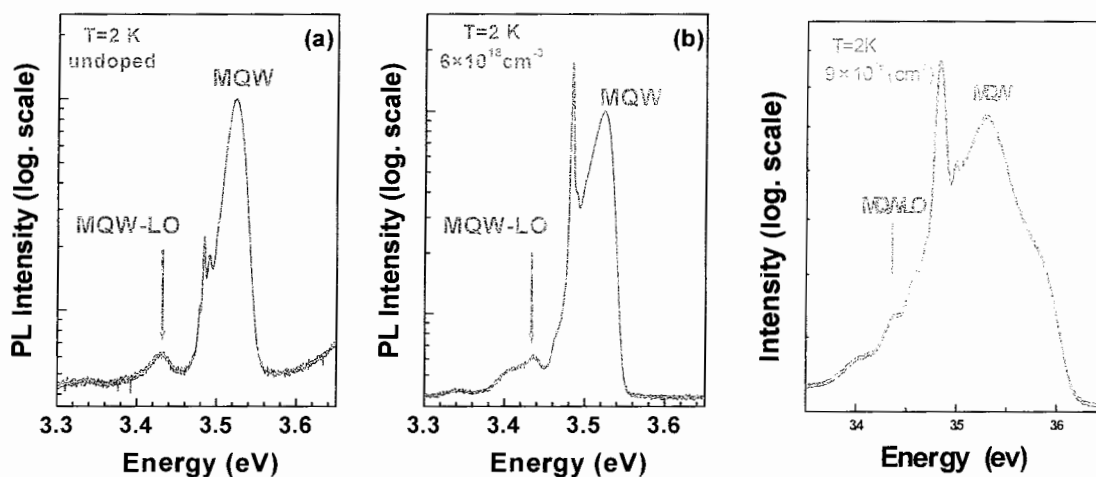
شکل ۶-۹: تغییرات زمان واهلش در انرژی پیک فوتولومینسانس حاصل از چاه های کوانتومی GaN/AlGaIn بر حسب چگالی آرایش سیلیکونی در دمای ۲K

جایگزیدگی حفره ها در دمای پایین از طریق دیگری نیز قابل اثبات می باشد و آن مشاهده جفت شدگی فونون های اپتیکی طولی (LO فونون ها) که به خوبی برای ساختارهای فوق دیده شده استⁱⁱ. هنگام

ⁱ Gallart

ⁱⁱ K. J. Nash and D. J. Mowbray, J. Lumin. **44**, 315 (1989).

باز ترکیب نوری اکسیتونها یا حاملهای آزاد در صورت جایگزیدگی آنها، طبق قانون بقای ممنتوم نیاز به حضور یک فونون می باشد. محتمل ترین فونون در فرآیند باز ترکیب نوری معمولاً فونون اپتیکی طولی یا LO- فونون می باشد. وجود رد پای^۱ LO- فونون که در طیف لومینسانس گسیلی از GaN در حدود ۹۲meV پایین تر از پیک اصلی مشاهده می گردد تأییدی بر جایگزیدگی اکسیتونها یا حاملهای آزاد می باشد. در شکل ۶-۱۰ این مطلب برای سه نمونه با آلایش های متفاوت نشان داده شده است. همانطور که از شکل نمایان است شدت جفت شدگی فونون های اپتیکی طولی برای پیک اصلی لومینسانس به وضوح با یکدیگر قابل قیاس هستند و البته این موضوع ناشی از جایگزیدگی اکسیتون ها یا حفره ها می باشد که به مقدار ناچیزی از الکترون های موجود در چاه GaN تأثیر می پذیرند. در نمونه بدون آلایش شدت جفت شدگی بیشتر می باشد که نشان دهنده انرژی جایگزیدگی بیشتر در این نمونه می باشد. این موضوع در بخش ۶-۶ دوباره بحث می شود و به صورت دقیق مقدار انرژی جایگزیدگی بدست می آید.



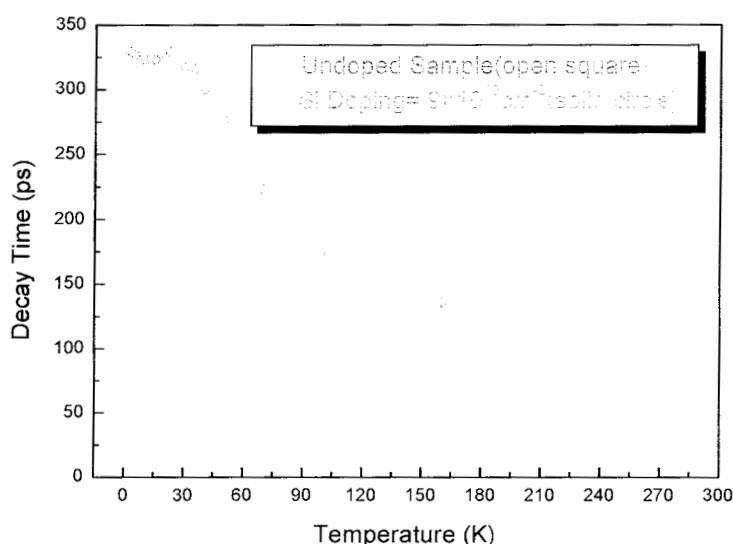
شکل ۶-۱۰: طیف PL سه نمونه با آلایش سیلیکونی متفاوت از گروه اول که جفت شدگی LO فونون ها در آنها قابل مشاهده و قابل مقایسه می باشد. به شدت جفت شدگی شدیدتر در نمونه بدون آلایش توجه کنید.

^۱ Phonon Replica

۵-۶- بررسی تجربی اثر آرایش سیلیکونی بر روی مکانیسم باز ترکیب نوری و غیرنوری در چاه

های کوانتومی چندگانه GaN/AlGaN

برای انجام بررسی های دقیق تر و درک رفتار زمان واهلش با افزایش دما و تشخیص اینکه باز ترکیب های تابشی و غیر تابشی هر کدام در چه محدوده دمایی نقش غالب را دارند، تغییرات زمان واهلش مربوط به پیک فوتولومینسانس حاصل از چاه های کوانتومی چندگانه گالیم نیتراید برحسب دما برای دو نمونه بدون آرایش و آرایش خیلی زیاد ($9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2}$) که در شکل ۱۱-۶ رسم شده است.



شکل ۱۱-۶: وابستگی دمایی زمان واهلش در انرژی پیک PL حاصل از QW ها به دما برای دو نمونه بدون آرایش و بیشترین آرایش سیلیکونی

همانطوری که از شکل پیداست در محدوده دماهای پایین زمان واهلش تقریباً ثابت است و علت آن باز ترکیب تابشی اکسیتون ها یا حامل های جایگزیده می باشد. به عنوان مثال اگر نمونه با آرایش خیلی زیاد را در نظر بگیریم، آنقدر حامل آزاد در دسترس وجود دارد که افزایش دما با مقدار کم که منجر به خارج شدن حامل ها از جایگزیدگی می شود، تاثیری در زمان واهلش باز ترکیب نخواهد داشت اما وقتی که دما به مقدار بیشتری افزایش می یابد، به دلیل نقش غالب باز ترکیب های غیر تابشی که سریعتر از باز ترکیب های تابشی می باشند، زمان واهلش تقریباً به صورت نمایی کاهش پیدا می کند. در همه چاه های کوانتومی نیتروژن دار، این رفتار زمان واهلش به خاطر تغییر رژیم باز ترکیب از باز ترکیب حامل ها یا

اکسیتون های جایگزیده در دماهای پایین به بازترکیب حامل ها یا اکسیتون ها آزاد در دمای بالایی باشد [۵]. در نمونه بدون آرایش زمان واهلش فوتولومینسانس از مقدار ۳۲۰ ps در دمای ۲K به ۴۰ps در دمای ۲۴۰K کاهش می یابد. در گزارش دیگری که از نمونه هایی شبیه به نمونه های ما استفاده شده ولی روش رشد بکاررفته روش MBE بود، نتایج مشابهی گزارش شده است [۶]. در نمونه با آرایش خیلی زیاد در بازده دمایی ۲-۳۵ کلون همانطور که در بالا اشاره شد افت و خیزهای کوچکی در زمان واهلش فرآیند بازترکیب در محل پیک PL حاصل از QW ها مشاهده می شود. در این نمونه زمان واهلش PL از مقدار ۳۳۰ps در دمای ۲K به مقدار ۵۰ps در دمای ۲۸۰K کاهش می یابد. این بدین معنی است که در مقایسه با نمونه بدون آرایش زمان واهلش در نمونه با آرایش خیلی زیاد، کاهش کندتری برحسب دما دارد (شکل ۶-۱۱)؛ و این به معنی آن است که بازترکیب تابشی نسبت به بازترکیب غیر تابشی تا دماهای بالاتری در نمونه های آرایش یافته غالب می باشد. در بیان علت مشاهده چنین رفتاری بایستی اشاره شود که در نمونه های آرایش یافته چون تعداد بازترکیب ها بیشتر از نمونه بدون آرایش می باشد (چون تعداد حامل های آماده بازترکیب زیادتر است) فوتون های بیشتری نسبت به نمونه بدون آرایش گسیل می شود و اگرچه با افزایش آرایش نقایص زیاد شده و LO فونون های بیشتری تولید می شود ولی در کل گسیل تابشی در نمونه آرایش یافته بدلیل حضور لایه دوبعدی الکترونهاي آزاد (2DEG)^۱ قویتر است. با استفاده از زمان واهلش اندازه گیری شده، $\tau_L(T)$ ، و شدت کل فوتولومینسانس در هر دما، $I_L(T)$ ، و با استفاده از رابطه های زیر می توانیم زمان های بازترکیب تابشی و غیر تابشی را محاسبه کرد:

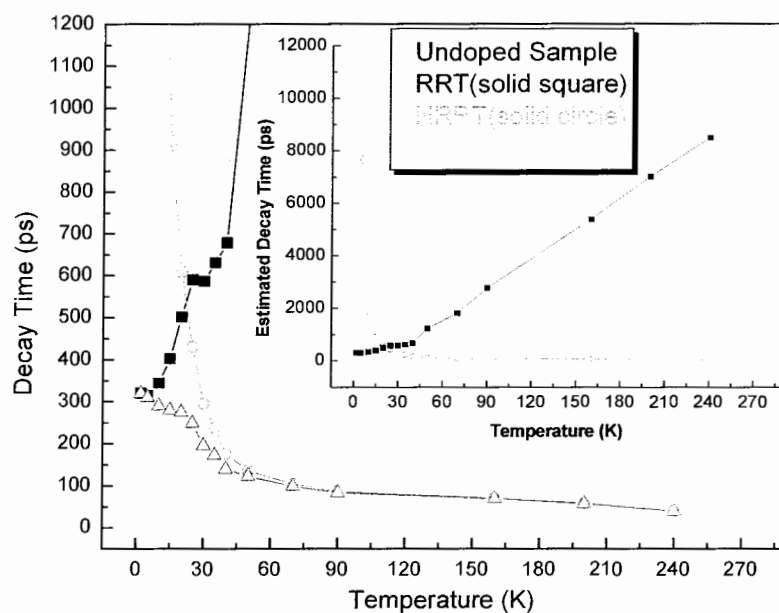
$$\tau_R(T) = \tau_L(T) I_L(0) / I_L(T) \quad (۱-۶)$$

$$\tau_{NR}(T) = \tau_L(T) I_L(0) / [I_L(0) - I_L(T)] \quad (۲-۶)$$

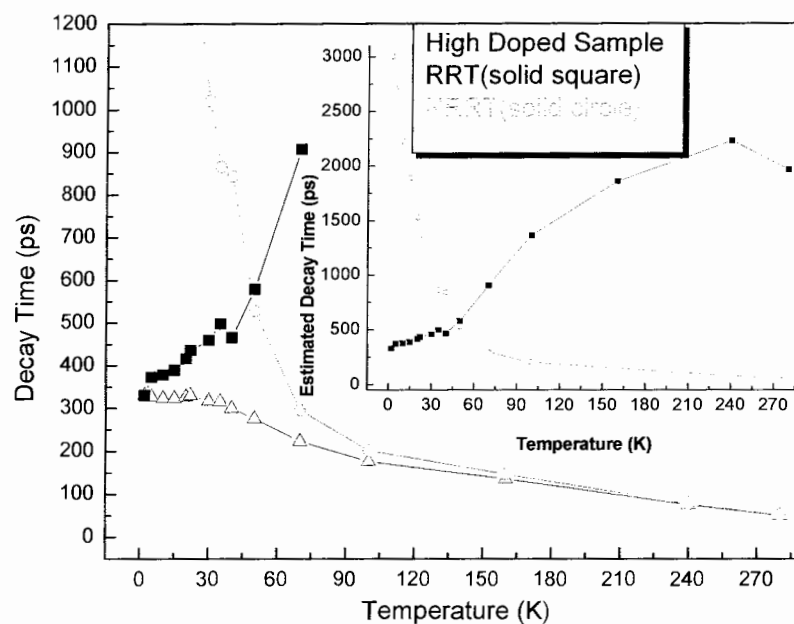
زمان های بازترکیب تابشی و غیرتابشی برحسب دما برای دو نمونه بدون آرایش و آرایش خیلی زیاد برحسب دما در شکل ۶-۱۲ و ۶-۱۳ رسم شده است. در شکل ۶-۱۲ مشاهده می شود که در نمونه بدون آرایش تا حدود دمای ۳۰K بازترکیب تابشی نقش غالب تری را دارد (چون همانطور که از روی شکل

^۱ 2 Dimensional Electron Gas

پیداست زمان بازترکیب مربوط به آن کوتاهتر است) و در دماهای بالاتر از ۳۰K ($T > 30\text{K}$) بازترکیب غیر تابشی غالب خواهد شد. همچنین در مورد نمونه آلاینش یافته از روی شکل ۶-۱۳ واضح است که تا دمایی حدود ۶۰ کلوین مکانیسم بازترکیب تابشی غالب می باشد و در دمای بالاتر از آن، بازترکیب غیر تابشی غالب خواهد شد. علی رغم حضور گاز الکترونی دوبعدی که از آلاینش سیلیکونی در سدهای AlGaIn ناشی می شود، در نمونه با آلاینش زیاد، علت غالب شدن مکانیسم بازترکیب غیرتابشی در این نمونه در دماهای بالاتر از ۶۰ کلوین وجود نقایص ساختاری فراوان در این نمونه می باشد. با توجه به بحثی که در فوق ارائه شد می توان نتیجه گرفت که در نمونه های آلاینش یافته با Si بازترکیب تابشی تا دماهای بالاتری غالب بوده و همچنین میزان گسیل تابشی از این نمونه ها در مقایسه با نمونه بدون آلاینش قویتر و بیشتر می باشد.



شکل ۶-۱۲: مقادیر اندازه گیری شده زمان واهلش (مثلثهای تو خالی) و مقادیر محاسبه شده زمانهای بازترکیب تابشی، τ_R ، و غیرتابشی، τ_{NR} ، در دماهای مختلف برای نمونه بدون آلاینش



شکل ۶-۱۳: مقادیر اندازه گیری شده زمان واهلش (مثلثهای تو خالی) و مقادیر محاسبه شده زمانهای بازترکب تابشی، τ_R ، و غیرتابشی، τ_{NR} ، در دماهای مختلف برای نمونه با بیشترین آلایش.

۶-۶- تعیین تجربی انرژی جایگزیدگی در چاه های کوانتومی GaN به کمک تغییرات دمایی منحنی های فوتولومینسانس

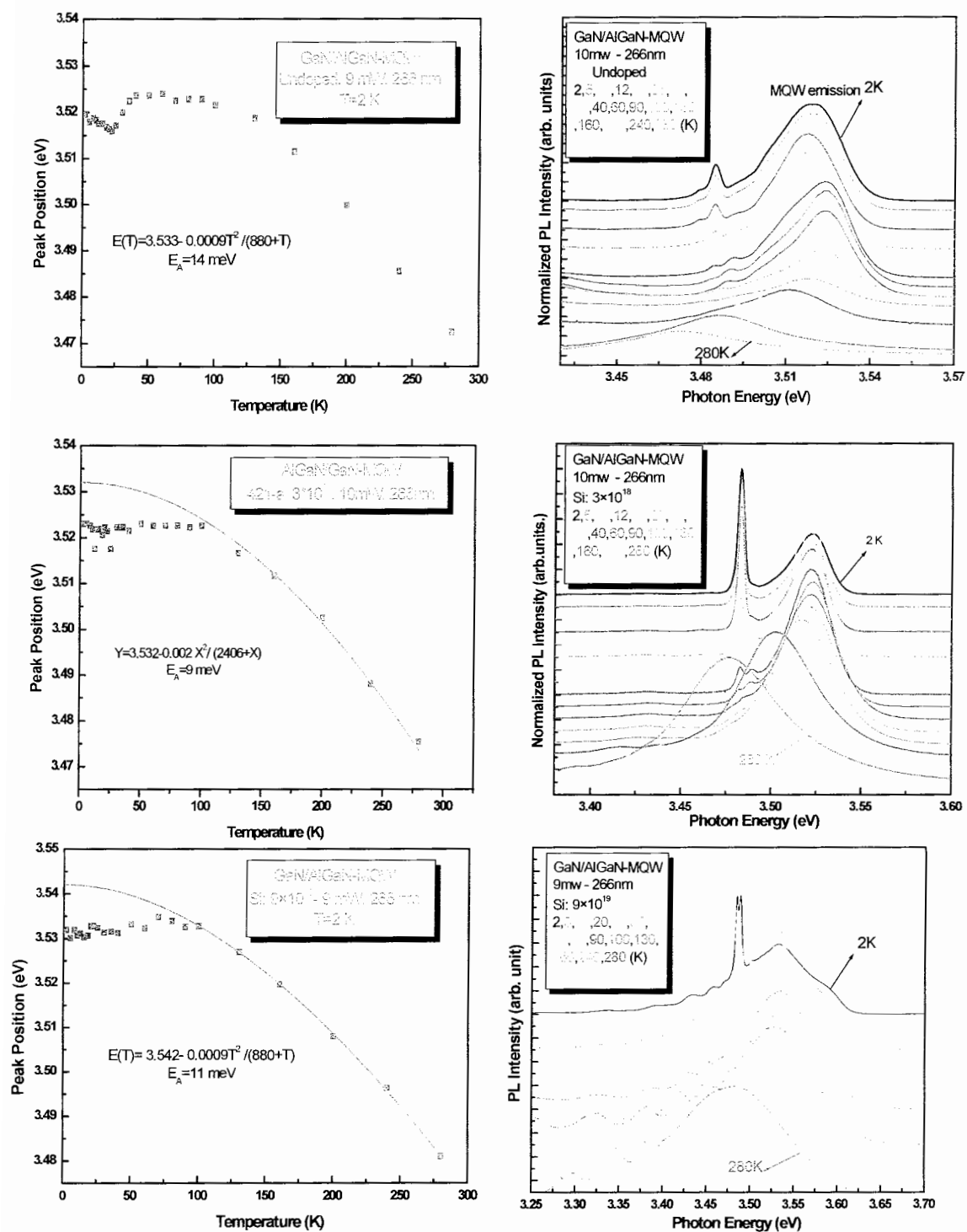
تکنولوژی نوری فوتولومینسانس ابزار قدرتمندی است که امکان مطالعه اپتیکی و درک مکانیسم بازترکیب ها و وابستگی دمایی و زمانی را در نانو ساختارهای کوانتومی (در اینجا چاه های کوانتومی چندگانه گالیم نیتراید) فراهم می آورد. در این قسمت ما با استفاده از این ابزار تغییرات انرژی پیک PL حاصل از نمونه ها را با افزایش دما برای یکسری از نمونه ها بررسی می کنیم و علت رفتارهای مشاهده شده در هر بازه دمایی را توضیح می دهیم و همچنین نقش آلایش سیلیکونی را در توجیه این رفتارها خواهیم دید. با بررسی وابستگی دمایی نمونه ها به شواهدی مبتنی بر جایگزیدگی اکسیتون ها در این نمونه ها حتی نمونه های با آلایش خیلی زیاد می توان دست یافت. در شکل ۶-۱۴ وابستگی دمایی طیف PL حاصل از نمونه های بدون آلایش و آلایش های $9 \times 10^{19} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ ، $4/2 \times 10^{19} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ و $3 \times 10^{18} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ همراه با بستگی دمایی انرژی پیک PL حاصل از این نمونه ها نشان داده شده است. با

بررسی نمودارهای بدست آمده مشخص می شود که در محدوده دماهای پایین و با افزایش دما به مقدار کم حامل ها انرژی لازم برای تحرک داشتن را پیدا می کنند و لذا در مینیمم های انرژی و یا افت و خیزهای پتانسیل جایگزیده می شوند و در نتیجه باعث شیفت انرژی گسیلی به سمت انرژی های کمتر می شوند. وقتی که دما به مقدار بیشتری افزایش می یابد، به خاطر خارج شدن همین حامل ها از جایگزیدگی شیفتی به سمت انرژی های بیشتر (آبی) در انرژی پیک PL مشاهده می شود. این شیفت آبی معمولاً تا دمای ۷۰K ادامه دارد. با افزایش دما به میزان بیشتر از ۷۰K ($T > 70\text{K}$)، از آنجا که گاف نواری نیمه رساناها با افزایش دما کاهش می یابد انرژی پیک PL بتدریج کاهش می یابد و به سمت قرمز شیفت پیدا می کند. البته در دو بازده دمایی قبلی این اثر یعنی کاهش انرژی گاف نواری با افزایش دما وجود داشت ولی در این قسمت این اثر کاملاً غالب می شود. بدین ترتیب یک منحنی اصطلاحاً به شکل Sⁱ بدست خواهد آمد لازم به ذکر است که اگرچه در نمونه های با آلایش بالا افت و خیزهای پتانسیل توسط حامل ها پر شده اند ولی مراکز ناخالصی همچنان برای جایگزیده کردن اکسیتون ها وجود دارند و اکسیتون ها جایگزیده می شوند. مقدار انرژی جایگزیدگی اکسیتون ها در این نمونه ها را می توان از روی تغییرات انرژی پیک PL حاصل از چاه های کوانتومی برحسب دما بطور تخمینی بدست آورد. برای انجام این کار بایستی داده های تجربی (مربع های توپر) را توسط فرمول ورشنی (Varshni) که به صورت [۷]:

$$E(T) = E(0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (3-6)$$

می باشد، فیت کرد. رابطه ورشنی تغییرات گاف انرژی GaN که ای را بر حسب دما بیان می کند. انرژی جایگزیدگی اکسیتون ها به طور تخمینی برابر با اختلاف بین انرژی پیک PL حاصل از داده های تجربی و انرژی بدست آمده از فیت کردن داده ها در دمای پایین می باشد. در فرمول ورشنی $E(0)$ انرژی گذار در 0 K می باشد و α , β دو ثابت هستند که در اندازه گیری های ما ۸۸۰K و ۰/۰۰۰۹(eV/K) بدست آمده اند؛ که با مقادیر بدست آمده برای اکسیتون نوع A، GaN مطابقت دارد [۸]. بدین ترتیب انرژی جایگزیدگی برای آلایش های مختلف بدست آمده و در جدول ۶-۱ گردآوری شده است.

ⁱ S- shape



شکل ۶-۱۴: نمودارهای وابستگی دمایی طیف PL حاصل از نمونه های بدون آرایش و آرایش های 9×10^{19} و 3×10^{18} (cm $^{-2}$) همراه با بستگی دمایی انرژی پیک PL حاصل از این نمونه ها

همانطور که از جدول ۶-۱ می توان دریافت، با افزایش آلایش Si تا $4/2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ مقدار انرژی جایگزیدگی کاهش می یابد و این کاهش به علت استتار موثر افت و خیزهای پتانسیل موجود در کف چاه های کوانتومی توسط الکترونهای ناشی از آلایش در سدها می باشد. فقط برای دو نمونه آخر با آلایش های خیلی زیاد (آلایش های بیشتر از $4/2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) انرژی جایگزیدگی شروع به زیاد شدن می کند که این موضوع به علت وجود نقایص ساختاری فراوان بوجود آمده در اثر آلایش زیاد در این نمونه ها می باشد [۹]. مقایسه بین نمونه بدون آلایش گالیم نیتراید مشابه که با روش MBE رشد یافته است میزان انرژی جایگزیدگی بیشتری (در حدود ۲۰ meV) را برای نمونه های MBE نشان می دهد [۱۰].

جدول ۶-۱: انرژی جایگزیدگی اکسیتون ها در چاه های کوانتومی GaN/AlGaIn در آلایش های سیلیکونی مختلف

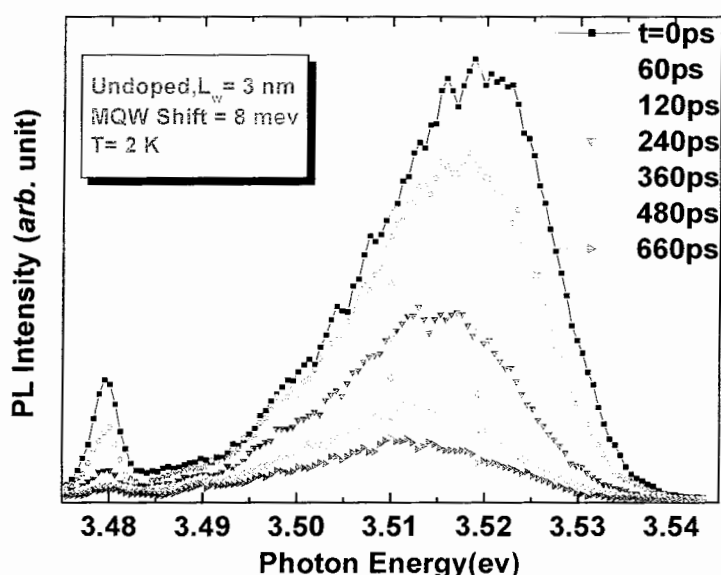
میزان آلایش (cm^{-3})	بدون آلایش	3×10^{18}	6×10^{18}	$2/4 \times 10^{19}$	$4/2 \times 10^{19}$	$6/5 \times 10^{19}$	9×10^{19}
انرژی جایگزیدگی (meV)	۱۴	۱۲	۱۱	۷	۶	۹	۱۰

۶-۷- رقابت حامل های نوری و دائمی در استتار میدان های قطبشی در چاه های کوانتومی

GaN/AlGaIn

همانطور که می دانیم در اثر برخورد نور لیزر به نمونه، یکسری حامل ها (الکترون ها و حفره ها) که اصطلاحاً حامل های نوری یا "نور تولید شده" نامیده می شوند، به وجود خواهد آمد. در این بخش ما نقش حامل های نوری را در استتار میدان های قطبشی داخلی چاه های کوانتومی به کمک تکنیک فوتولومینسانس وابسته به زمان مورد مطالعه قرار می دهیم و در مورد رقابت حامل های موقتی (حامل های نوری) و حامل های دائمی (ناشی از آلایش سیلیکونی در سدها) در استتار میدان ها به بحث می

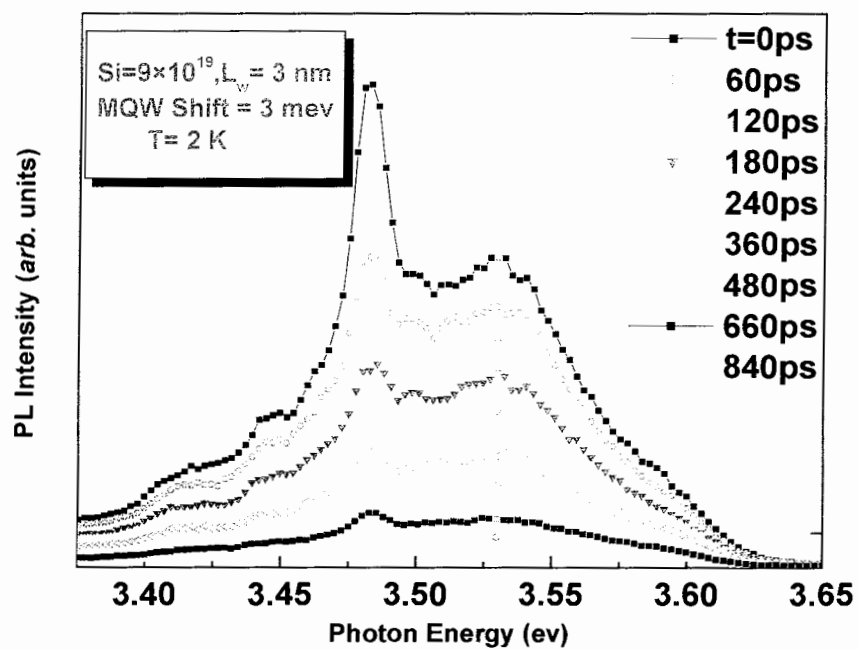
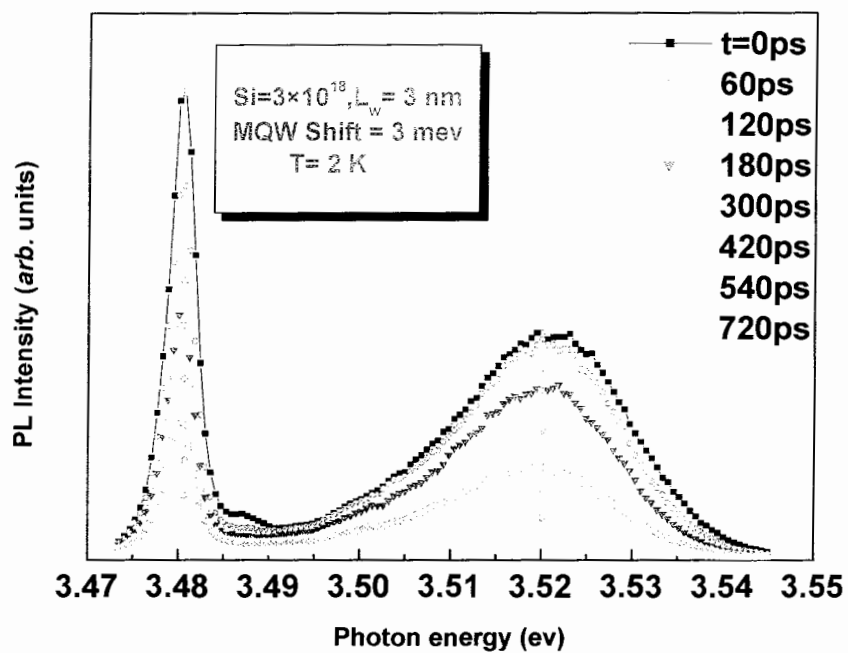
پردازیم. همانطور که اشاره شده با استفاده از روش TRPL می توان استتار میدان های داخلی توسط حامل های ناشی از آرایش سیلیکونی را تعیین کرد. در این قسمت برای آزمایش های فوتولومینسانس وابسته به زمان از هارمونیک سوم لیزر پالسی Ti:Sapphire با طول موج ۲۶۶ nm به عنوان منبع تحریک کننده استفاده شده است. در شکل ۶-۱۵ تغییرات زمانی طیف PL نمونه بدون آرایش با پهنای چاه ۳ nm در دمای ۲K نشان داده شده است. اندازه گیری انرژی پیک PL حاصل از چاه های کوانتومی در ۶۰۰ps اولیه تحریک نمونه بوسیله نور لیزر نشان می دهد که شیفی به اندازه ۸ meV در انرژی پیک PL حاصل از چاه ها در این نمونه به سمت انرژی های کمتر (شیفت به قرمز) دیده می شود. در بیان دلیل مشاهده چنین شیفی باید بگوییم که تعداد حامل های نوری با گذشت زمان به علت اینکه این حامل ها با یکدیگر بازترکیب می کنند، کم می شود؛ و از آنجا که این حامل ها مسئول اصلی استتار میدان های قطبشی در چاه های کوانتومی نمونه بدون آرایش می باشند، با گذشت زمان و کاهش حامل ها، استتار موثر میدان ها توسط این حامل ها کم شده و لذا اثر کوانتومی استتارک زیاد می شود. در نتیجه شیفی به سمت انرژی های کمتر در انرژی پیک PL دیده می شود



شکل ۶-۱۵: وابستگی به زمان طیف فوتولومینسانس حاصل از نمونه بدون آرایش در ۶۰۰ps بعد از تابش نور لیزر

در شکل ۶-۱۶ طیف فوتولومینسانس وابسته به زمان مشابه بدست آمده از دو نمونه با آلایش سیلیکونی به ترتیب $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{18} \times 3$ و $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{19} \times 9$ نیز در دمای ۲K نشان داده شده است. اندازه گیری نشان دهنده شیفی به اندازه ۳ meV و ۱ meV در انرژی پیک PL چاه های کوانتومی در طی ۶۰۰ps اولیه بعد از تابش نور لیزر برای نمونه های با آلایش $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{18} \times 3$ و $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{19} \times 4/2$ می باشد. ولی هیچ گونه شیفی برای نمونه با آلایش $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{19} \times 9$ دیده نمی شود (شکل مربوط به نمونه با آلایش $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{19} \times 4/2$ نشان داده نشده است). در توضیح علت مشاهده چنین رفتاری بایستی بگوییم که برای برانگیختگی نمونه ها از لیزری که دارای مشخصات $f = 250 \text{ KHz}$ و $\tau_0 = 200 \text{ fs}$ و توان برانگیختگی ۲۰mw و قطر لکه لیزر $100 \mu\text{m}$ است، استفاده شده است. و با فرض اینکه ضریب جذب در طول موج برانگیختگی $(\text{cm}^{-1}) \times 10^5 \times 1/5$ باشد [۱۱]، ماکزیمم حامل های نوری در نمونه، $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{18} \times 2$ خواهد بود که به وضوح از تعداد حامل های ناشی از آلایش در سدها کمتر از و لذا مشاهده شیف کمتر در نمونه های با آلایش $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{18} \times 3$ در مقایسه با نمونه های بدون آلایش منطقی به نظر می رسد؛ چون در این نمونه ها نقش حامل های نوری در استتار کردن با وجود و حضور حامل های ناشی از آلایش سیلیکونی کم رنگ تر شده است. در مورد نمونه با آلایش خیلی زیاد $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{19} \times 9$ تعداد حامل های حاصل از آلایش در سدها که به چاه وارد شده اند آنقدر زیاد است که نقش حامل های نوری در استتار کردن میدان های قطبشی به صفر میل می کند و گذشت زمان و کاهش حامل های نوری تاثیر در میزان استتار میدان های قطبشی نخواهد داشت و شیفی را که در مورد نمونه های بدون آلایش و آلایش کم مشاهده کردیم، در مورد نمونه با آلایش بالا اصلاً نمی بینیم.

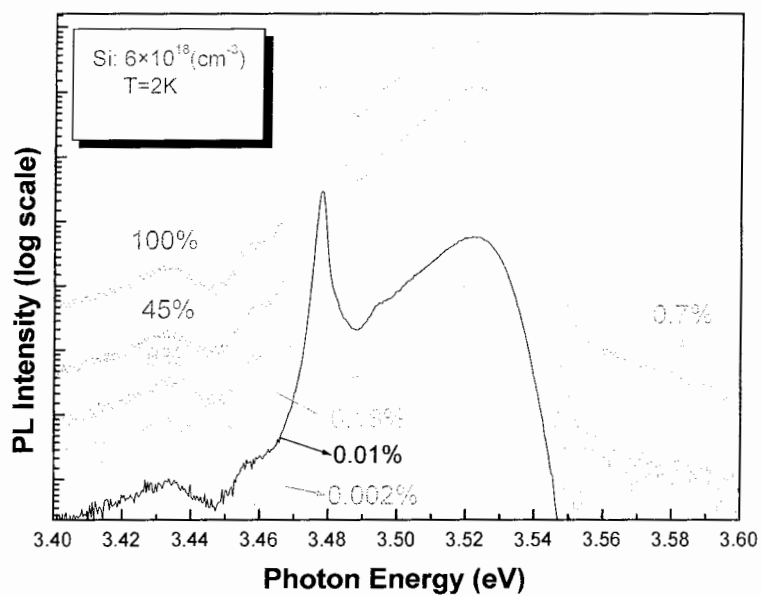
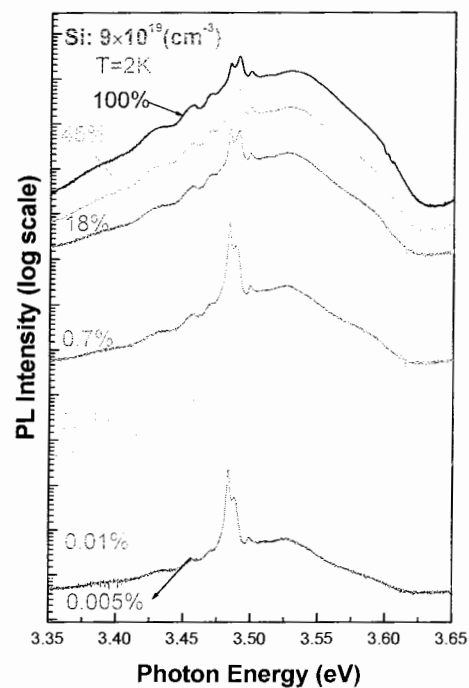
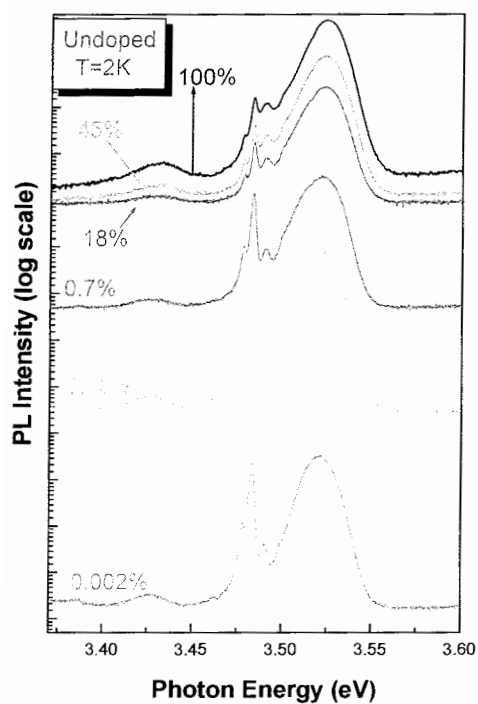
نهایتاً به این نتیجه رهنمون می شویم که استفاده از حامل های خارجی که توسط آلایش در سیستم قابل ایجاد هستند، برای استتار میدان های پیزوالکتریک داخلی و در نتیجه حذف اثر کوانتومی استتار موثر می باشد. البته میزان چگالی آلایش به نحوی باید محاسبه گردد که حامل های نوری تاثیری بر انرژی گسیلی از قطعه اپتوالکترونیکی نداشته باشد. در محاسبات بالا اولین چاه کوانتومی تقریباً ۱۴٪ از نور لیزر را جذب می کند و مقدار جذب نور در چاه های کوانتومی بعدی کاهش می یابد و در نتیجه تعداد حامل های برانگیخته در چاه های بعدی کاهش می یابد.



شکل ۶-۱۶: وابستگی به زمان طیف فوتولومینسانس حاصل از نمونه های با آرایش های $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{18} \times 3$ و $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{18} \times 3$ در دمای ۲K

۶-۸- مطالعه وابستگی نوری لومینسانس نمونه ها در اثر تغییر شدت نور تحریکی

برای بررسی اثر شدت باریکه لیزر تابیده شده به نمونه در طیف PL و نقش حامل های نوری در استتار کردن میدان های داخلی طیف فوتولومینسانس سه نمونه به ترتیب بدون آلاش و نمونه هایی با آلاش $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{18} \times 6$ و $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{19} \times 9$ در شکل ۶-۱۷ آورده شده است. در نگاه اول دو موضوع مهم به چشم می خورد اول اینکه با افزایش شدت شیفی به سمت آبی در انرژی پیک PL حاصل از چاه های کوانتومی دیده می شود و ثانیاً با افزایش شدت پهن شدگی در طیف PL حاصل از QW ها به چشم می خورد. با اندازه گیری مشخص شده است که با کاهش شدت نور باریکه لیزر از ۱۰۰٪ به ۰۰۲٪ مقدار شدت اولیه، شیفی به اندازه تقریباً ۴ meV در نمونه بدون آلاش دیده خواهد شد و همچنین در مورد نمونه هایی با آلاش $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{18} \times 6$ و $(\text{cm}^{-2}) \times 10^{19} \times 9$ این شیفی به ترتیب ۱ meV و صفر خواهد بود. علت مشاهده این شیفی در پیک فوتولومینسانس حاصل از QW ها با کاهش شدت این است که تعداد حامل های نوری با کاهش شدت کاهش می یابد و لذا استتار میدان های قطبشی داخلی موجود در چاه های کوانتومی کاهش می یابد و لذا اثر کوانتومی استارک قوی تر می شود. علت این مطلب که با افزایش آلاش مقدار شیفی کاهش می یابد این است که همانطور که در بخش قبل گفته شده در آلاش های بالا نقش غالب در استتار میدان های داخلی با حامل های آلاشی است و نه با حامل های نوری و لذا این شیفی با افزایش آلاش کاهش می یابد و در آلاش های خیلی بالا به صفر می رسد. اگر به شکل ۶-۱۷ به دقت توجه کنیم خواهیم دید که در همه نمونه ها وقتی که شدت نور تابشی افزایش می یابد طیف PL ناشی از QW ها پهن می شود. علت این پهن شدگی این است که وقتی شدت، افزایش می یابد نور لیزر به چاه های پایینی نیز می رسد و حامل های موجود در این چاه ها را نیز می تواند برانگیخته کند و لذا با افزایش شدت گسیل از همه چاه ها را خواهیم داشت و چون چاه های کوانتومی نمونه خاص اولاً دارای پهنای یکسانی نیستند و ثانیاً میدان های قطبشی داخلی آنها به مقدار یکسانی استتار نمی شود، (بدلیل اینکه تعداد حامل ها در چاه های مختلف متفاوت است) در نتیجه اثر استارک در آنها متفاوت است، و گسیل های غیر یکسانی از لحاظ مقدار انرژی از چاه های متفاوت بدست می آید که باعث پهن شدگی طیف PL نمونه می شود (شکل ۶-۱۷ را ملاحظه کنید)



شکل ۶-۱۷: نمودارهای وابستگی به شدت نور لیزر طیف فوتولومینسانس در نمونه های بدون آرایش و آرایش سیلیکونی $(\text{cm}^{-3}) \times 10^{19} \times 9$ و $(\text{cm}^{-3}) \times 10^{18} \times 6$ در دمای ۲K

- [١] *Low- Dimensional Nitride Semiconductors*, Edited by B. Gil, First published 2002, Oxford Uni. Press.
- [٢] B. Monemar, H. Haratizadeh, P.P. Paskove, J. P. Bergman, E. Valcheva, B. Arnaudov, A. Kasic, P. O. Holtz, G. Pozina, S. Kamiyama, M. Iwaya, H. Amano, and I. Akasaki, *Phys. Stat. Sol. (c)*, **10** (2004).
- [٣] M. Gallart, A. Morel, T. Taliercio, P. Lefebvre, B. Gil, J. Allegre, H. Mathieu, N. Grandjean, M. Leroux and J. Massies, *Physica. Status Solidi A* **180** 127 (2000)
- [٤] M. Gallart, A. Morel, T. Taliercio, P. Lefebvre, B. Gil, J. Allegre, H. Mathieu, N. Grandjean, M. Leroux and J. Massies, *Physica. Status Solidi A* **180** 127 (2000).
- [٥] P. Lefebvre, S. Anceau, P. Valvin, T. Taliercio, L. Konczewicz, S.P. Lepkowski, et. al.; *Phys. Rev. B* **66**, 195330 (2002).
- [٦] P. Lefebvre, J. Allegre, B. Gil, H. Mathieu, N. Grandjean, M. Leroux, J. Massies, and P. Bigenwald; *Phys. Rev. B* **59**, 15363 (1999).
- [٧] Y. P. Varshni; *Physica* **34**, 149 (1967).
- [٨] M. Leroux, N. Grandjean, B. Beaumont, G. Nataf, F. Semond, J. Massies, and P. Gibart, *J. Appl. Phys.* **86**, 3721 (1999).
- [٩] L. T. Romano, C. G. Van de Walle, J. W. Ager III, W. Götz, and R. S. Kern, *J. Appl. Phys.* **87**, 7745 (2000).
- [١٠] M. Leroux, N. Grandjean, M. Laugt, J. Massies, B. Gil, P. Lefebvre, and P. Bigenwald, *Phys. Rev. B* **58**, R13371 (1998).
- [١١] J. F. Muth, J. D. Brown, M. A. I. Johnson, Zhonghai Yu, R. M. Kolbas, J. W. Cook, and J. F. Schetzina, *MRS Internet J. Nitride Semicond Res.* **4S1**, G5.2 (1999).

استتار میدان های قطبشی داخلی نانو ساختارهای گالیم نیتراید

اسمعیلی^۱، مرتضی؛ هراتی زاده^{۲،۱}، حمید؛ مومناز^۲، بو؛ کامی یاما^۳

^۱گروه فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود، بلوار دانشگاه، شاهرود

^۲انستیتوی فیزیک و تکنولوژی سنجش دانشگاه لیشوینگ، لیشوینگ، سوند

^۳انستیتوی مهندسی برق و الکترونیک دانشگاه میجو، ناگویا، ژاپن

چکیده

اثر پوششی ناخالصی Si بر روی میدانهای قطبشی داخلی موجود در ساختار GaN/AlGaN و نحوه استتار این میدانها توسط الکترونهای آزاد موجود در چاه GaN و همچنین اثر آرایش سیلیکونی روی انرژی جایگزینی حاملها به روش اپتیکی در این مقاله مطالعه شده است. در اینجا نشان داده شده است که میدانهای قطبشی داخلی در نمونه های با آرایش متوسط و بالا توسط الکترونهایی که از آرایش سدها با اتمهای Si نشأت میگیرند استتار شده اند. به دلیل استتار میدانهای قطبشی داخلی همپوشانی توابع موج الکترون و حفره افزایش یافته و در نتیجه راندمان نوری نمونه ها با افزایش آرایش Si افزایش می یابد.

مقدمه

نیمرساناهای نیتروژندار (InN, GaN, AlN) دارای گاف انرژی مستقیم و پهن هستند که این دو روی هم باعث شده است که به طور فزاینده ای از این گروه از مواد در ساخت قطعات اپتوالکترونیکی به ویژه دیودهای نوری استفاده شود. یکی از خواص مهم مواد تری نیتراید حضور و وجود بارهای قطبشی در سطوح خارجی و سطوح مشترک آنها می باشد. این دسته از مواد به طور طبیعی در ساختار ورتسایتس متبلور می شوند و دارای یک شبکه پراوه شش گوش با حضور چهار اتم بر هر سلول واحد هستند. اندازه گیری فتولومینسانس نانو ساختارهای GaN/AlGaN و InGaN/GaN حضور میدانهای الکتریکی داخلی ناشی از بارهای قطبشی القایی را به اثبات می رساند [۱-۲]. این میدانهای داخلی که در چاه کوانتمی بوجود می آیند بر روی خواص اپتیکی نمونه مورد بررسی به شدت تاثیر می گذارند و مکان طیفی پیک فتولومینسانس و همچنین مکانیسم باز ترکیب حاملها و میزان همپوشانی توابع موج الکترون و حفره را تحت تاثیر قرار می دهند. علاوه بر میدان پیزو الکتریک که بر اثر اختلاف ثابت شبکه بین مواد لایه و زیر لایه بوجود می آید، میدان الکتریکی دیگری بنام میدان الکتریکی خودبخودی به دلیل تقارن کم در ساختار کریستالی ورتسایتس نیز وجود دارد که راستای آن در راستای رشد کریستال می باشد. علاوه بر دو میدان الکتریکی فوق میدان دیگری نیز به علت وجود حالت های سطحی و تخلیه الکترون ها از سطح خارجی نمونه به داخل چاهها بوجود می آید [۳-۴].

نمونه ها و روش تجربی

ساختار چاههای کوانتمی چند گانه که در اینجا بررسی می شود روی زیر لایه اکسید آلومینیم ودر جهت (۰۰۰۱) رشد یافته اند. روش رشد مورد استفاده رسوب گذاری بخار شیمیایی (MOCVD) بوده است. روی زیر لایه یک لایه به ضخامت ۲۰ nm از AlN و یک لایه بافر GaN بدون آرایش (حدود ۲ μm) رشد داده شده است. بعد از آن ساختار

چاه‌های کوانتومی چند گانه که شامل پنج چاه GaN با پهنای حدود ۳nm که توسط ضخامت ۷nm سد AlGaIn از یکدیگر جدا شده است رشد داده شده اند. یکسری از نمونه‌ها توسط سیلیکون آلیش شده و مقدار آلیش از 10^{18} cm^{-3} تا حدود 10^{20} cm^{-3} متغیر است. برای برانگیختگی اپتیکی در اندازه گیری ها از یک لیزر با طول موج ۲۶۶nm استفاده شده است. سیگنال لومینسانس حاصله توسط یک تکفام ساز پراشیده شده و بوسیله یک دوربین CCD آشکار سازی شد. اندازه‌گیریها از دمای هلیوم مایع ۲K تا دمای اتاق (RT) انجام شده است.

تحلیل نتایج و بحث

در ابتدا با یک محاسبه تئوری اندازه میدانهای قطبشی را حدوداً برآورد کرده و سپس به چگونگی استتار این میدان‌ها توسط آلیش سیلیکونی در سدها خواهیم پرداخت. ثابت شبکه تنش یافته برای چاههای GaN در دماهای پایین در حدود $3/183 \text{ \AA}$ تخمین زده می شوند. [۳] برای نمونه مورد بررسی به علت اینکه نمونه در جهت (۰۰۰۱) رشد یافته تمام درایه‌های تانسور پیزو الکتریک آن بجز یک درایه صفر خواهد شد و این درایه غیر صفر از رابطه زیر حساب می شود [۳-۵]

$$P_{PZ} = 2(a-a_0)/a_0 \{e_{31}-e_{33} C_{13}/C_{33}\} \quad (1)$$

که در آن a_0 و a به ترتیب ثابت شبکه تنش یافته و تنش نیافته و e_{31} و e_{33} مولفه های تانسور میدان پیزوالکتریک و C_{13} و C_{33} مولفه های تانسور الاستیک می باشند. با استفاده از مقادیر عددی آنها و همچنین مقدار ثابت شبکه تنش نیافته $3/189 \text{ \AA}$ برای چاههای GaN و $a = 3/183 \text{ \AA}$ خواهیم داشت [۵].

$$P_{PZ} \approx 0.02 \text{ (C/m}^2\text{)}$$

برای سدهای $\text{Al}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{N}$ نیز، $a_0 = 3/183 \text{ \AA}$ است و اگر از مقدار a بالا استفاده کنیم $P_{PZ} = 0$ خواهد شد. برای قطبش خود بخودی نیز با یک درونیابی ساده به مقادیر عددی $P_{SP} = -0.038 \text{ (C/m}^2\text{)}$ برای سدها و مقدار $P_{SP} = 0.034 \text{ (C/m}^2\text{)}$ برای چاههای GaN می رسم [۶-۷] و لذا جمع قطبش ها به صورت ذیل خواهد بود:

$$P_{tot} = P_{SP} + P_{PZ} \approx -0.038 \text{ (C/m}^2\text{)} \quad \text{برای سدهای AlGaIn} \quad (2)$$

$$P_{tot} = P_{SP} + P_{PZ} \approx -0.032 \text{ (C/m}^2\text{)} \quad \text{برای چاههای GaN} \quad (3)$$

و با استفاده از رابطه‌های مربوط به میدان الکتریکی در داخل چاه و سد یعنی روابط $E_w = (P_b - P_w)L_b/(L_w - L_b)\epsilon_0\epsilon$ و $E_b = (P_w - P_b)L_w/(L_w + L_b)\epsilon_0\epsilon$ به ترتیب برای چاههای GaN و سدهای AlGaIn و استفاده از مقادیر عددی $L_b = 3\text{nm}$ و $L_w = 7\text{nm}$ و $\epsilon = 10$ برای E_w مقدار 0.48MV/cm و برای E_b مقدار 0.2MV/cm بدست می آید. این میدان‌ها در حالتی که هیچ آلیشی به سدها وارد نشده محاسبه شده‌اند و جهت میدان ها نیز به طرف زیر لایه در چاههای کوانتومی می باشد. اگر یک برآوردی از پهنای ناحیه تهی که در اثر انتقال الکترونها سطح خارجی نمونه به داخل ناحیه فعال ایجاد می شود را نیز انجام دهیم می بینیم که در حالتی که آلیش سیلیکونی خیلی زیاد باشد پهنای ناحیه تهی $W_n = 4/5\text{nm}$ می باشد و در نمونه بدون آلیش $W_n = 45\text{nm}$ خواهد شد [۳]. و این بدین معنی است که برای نمونه های شدیداً آلیش یافته فقط یکی و یا دوتا چاه اول تحت تاثیر میدان تهی قرار می گیرند و برای نمونه های آلیش نیافته یا کم آلیش یافته تمام ناحیه فعال از میدان تهی تاثیر می پذیرند [۳۸]. جهت این میدان نیز در خلاف جهت آن دو میدان دیگر است [۴]. برای نمونه ما که پنج چاه کوانتومی دارد در آلیش های سیلیکونی متوسط حدود یک تا دوتا از چاهها در خارج ناحیه تهی قرار می گیرند و بقیه چاهها عملاً بدلیل شدت

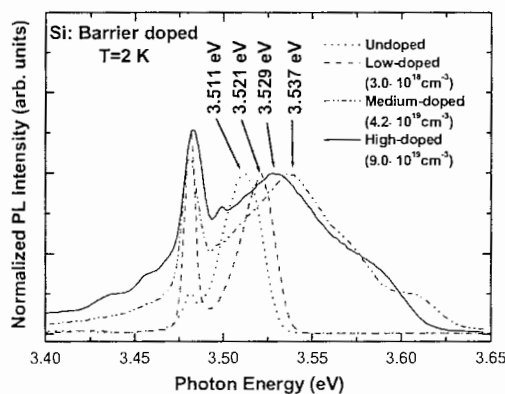
میدان غیرفعال می‌شوند و گسلی از آنها مشاهده نمی‌شود زیرا تراز پایه در خارج چاه تشکیل یافته و عملاً حامل‌ها بطرف چاه‌های بعدی فرار می‌کنند. در شکل (۱) طیف فتولومینسانس مربوط به یک مجموعه از نمونه‌های GaN/AlGaIn در دمای ۲K و با آلایش Si که دارای چگالی متفاوت از $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ تا $9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ می‌باشند را نشان می‌دهد. در آلایش‌های کم پیک فتولومینسانس منشأ اکسیتونی دارد ولی در آلایش‌های زیاد مکانیسم بازترکیب اکسیتونی به بازترکیب بین الکترون‌های آزاد و حفره‌های جایگزیده تبدیل می‌گردد [۹]. دلیل آن این است که ما الکترون آزاد به اندازه کافی با عمل آلایش در دسترس داریم ولی تعداد حفره‌ها همان تعداد اولیه که جایگزیده نیز می‌باشند

باقی می‌مانند. مشاهده طیف اپتیکی حاصل از

نمونه‌ها در شکل (۱) نشان می‌دهد که مکان طیفی پیک فتولومینسانس حاصل از چاه کوانتومی، نسبت به مکان طیفی پیک فتولومینسانس حاصل از GaN کپه‌ای که در $(3/48 \text{ eV})$ قرار دارد، یک شیفت به سمت آبی (انرژی‌های بیشتر) نشان می‌دهد که علت آن اثر محدودیت کوانتومی می‌باشد.

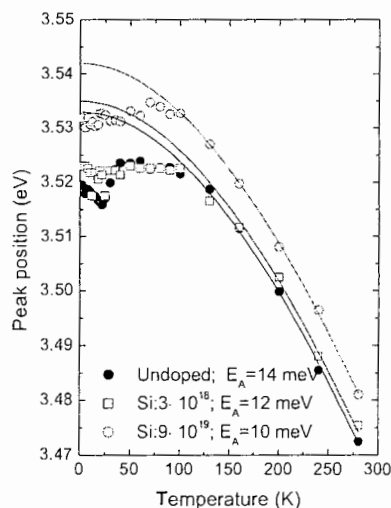
حضور میدان‌های داخلی در نمونه‌ها سبب اثر کوانتومی استارک (QCSE) و در نتیجه شیفت انرژی گسلی به سمت انرژی‌های کمتر می‌گردد،

شکل ۱: طیف فتولومینسانس نمونه‌های با چگال آلایش متفاوت در دمای



که با آلایش نمونه‌ها و فراوانی الکترون‌های ناشی از اتم‌های Si در درون چاه میدان‌های داخلی استار شده و در نتیجه اثر کوانتومی استارک کاهش یافته و طیف گسلی فتولومینسانس به سمت انرژی‌های بالاتر شیفت می‌یابد. همانگونه که از شکل (۱) استنباط می‌شود وجود آلایش سیلیکون به نحو مؤثری بازده نوری نمونه‌ها را نیز افزایش می‌دهد که این موضوع از مقایسه سطح زیر منحنی فتولومینسانس قابل درک است. این مسأله از آنجا ناشی می‌شود که استار میدان‌های داخلی باعث افزایش همپوشانی توابع موج الکترون و حفره و در نتیجه افزایش راندمان نوری در بازترکیب الکترون و حفره می‌گردد.

اگر وابستگی دمایی فتولومینسانس حاصل از چاه‌های کوانتومی GaN/AlGaIn را از دمای ۲K تا ۳۰۰K برای نمونه‌های با آلایش مختلف بررسی کنیم می‌بینیم که با توجه به شکل (۲) انرژی جایگزیدگی اکسیتونها با آلایش تغییر می‌کند و با افزایش آلایش انرژی جایگزیدگی از 14 meV برای نمونه بدون آلایش تا حدود 6 meV برای نمونه با آلایش (cm^{-2}) $4/2 \times 10^{19}$ کاهش پیدا می‌کند (نمودار وابستگی دمایی فتولومینسانس فقط برای سه نمونه در شکل ۲ نشان داده شده است) و علت این کاهش نیز به استار مؤثر میدان‌های داخلی که توسط آلایش سیلیکونی انجام می‌شود، مربوط می‌گردد. البته



شکل ۲: وابستگی دمایی مکان فله PL برای سه نمونه

برای دو نمونه دیگر که آلایش آنها بیشتر از $(\text{cm}^{-3}) \times 10^{19} \times 4/2$ می باشد دوباره انرژی جایگزینی اکسیتونها شروع به زیاد شدن می کند که علت آن وجود نقایص ساختاری زیاد در این نمونه ها می باشد.

نتیجه گیری

در این گزارش ما ضمن محاسبه تقریبی میدانهای قطبشی داخلی شامل میدانهای پیزوالکتریک و خودبخودی برای ساختار بدون آلایش چاههای کوانتومی چندگانه $\text{GaN}/\text{Al}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{N}$ طیف فتولومینسانس گروهی از این نمونه ها را که سد آنها با Si آلایش یافته بود را مورد بررسی قرار دادیم و به این نتیجه رسیدیم که پیک فتولومینسانس حاصل از این چاهها به دلیل استتار میدانهای قطبشی داخلی توسط الکترونهايي که از اتمهای Si در لایه AlGaN به داخل چاه فرو می ریزند به سمت انرژیهای بالاتر شیفت می یابد از طرف دیگر اثر این آلایش در افزایش راندمان نوری نمونه ها به خوبی قابل مشاهده می باشد.

مراجع:

1. O.Ambacher, R.Dimitrov, M.Stutzmann, B.E.Foutz, M.J.Murphy, et.al., *Phys.Stat.Sol.(b)* **216**, 381 (1999)
2. M.Leroux, N.Grandjean, M.Laugt, J.Massies, B.Gil, P.Lefebvre, P.Bigenwald, *Phys.Rev.B* **58**, R13371 (1998)
3. B.Monemar, H.Haratizadeh, P.P.Paskov, G.Pozina, P.O.Holtz, J.P.Bergman, S.Kamiyama, M.Iwaya, H.Amano, I.Akasaki, *Phys.Stat.Sol.(b)* **237**, 353 (2003)
4. R.Cingolani, A.Botchkarev, H.Tang, H.Morkc, G.Traetta, G.Coli, M.Lomascolo, A.Di Carlo, F.De Ila Sala and P.Lugli, *Phys.Rev.B* **61**, 2711 (2000)
5. O.Ambacher, J.Majewski, C.Miskys, A.Link, M.Hermann, M.Eickhoff, M.Stutzmann, F.Bernardini, V.Fiorentini, et.al., *J.Phys.:Condens.Mattr.* **14**, 3399 (2002)
6. F.Bernardini, V.Fiorentini, D.Vanderbilt, *Phys.Rev.B* **63**, 193201 (2001)
7. F.Bernardini, V.Fiorentini, *Phys.Rev.B* **64**, 085207 (2001)
8. V.Fiorentini, F.Bernardini, F.Della Sala, A.Di Carlo, P.Lugli, *Phys.Rev.B* **60**, 8849 (1999)
9. H.Haratizadeh, P.P.Paskov, G.Pozina, P.O.Holtz, B.Monemar, S.Kamiyama, M.Iwaya, H.Amano, and I.Akasaki, *Appl.Phys.Lett.* **80**, 1373 (2002)

Dynamical study of the radiative recombination processes in GaN/AlGa_N QWs

M. Sabooni¹, M. Esmaili¹, F. Tabasi¹, H. Haratizadeh^{1,2}, B. Monemar², H. Amano³

1) Department of Physics, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

2) Department of Physics and Measurements Technology, Linköping University,
S-581 83 Linköping, Sweden

3) Department of Electrical and Electronic Engineering, Meijo University, 1-501
Shiogamaguchi, Tempaku-ku, Nagoya 468, Japan

E-mail: hamba@walla.com

PACS 78.47.+p, 78.55.Cr, 78.67.De

The effects of the Si doping level on the recombination dynamics and carrier (exciton) localization in modulation-doped GaN/Al_{0.07}Ga_{0.93}N multiple-quantum-well (MQW) structures were studied by means of photoluminescence (PL) and time-resolved PL measurements. All samples with different doping levels show a QW emission which is blue shifted with respect to the 3.48 eV PL peak from the GaN buffer layer. The decay time at the peak position remains nearly constant in the range of 320-420 ps at 2 K for all doping levels. For the undoped and low-doped samples ($3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), which have less free electrons in the QWs, a non-exponential PL decay behaviour at 2 K is attributed to localized exciton recombination. The more highly doped samples ($5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ to 10^{20} cm^{-3}) show almost exponential decay curves at 2 K, suggesting the recombination of free electrons and localized holes. The internal polarization-induced fields of the medium and highly-doped samples are partly screened by the electrons originating from the doping in the barriers. The emission peaks in time delayed PL spectra of these samples exhibit almost no shift as time evolves. Only the PL peak of the undoped and low-doped samples shows a redshift with time delay, related to the photogenerated carriers [1]. The decay time for the undoped sample shows non-exponential behaviour typical for localized excitons in III-N QWs. The same behaviour of decay time as a function of emission energy has been reported for InGa_N QWs [2].

[1] H. Haratizadeh, B. Monemar, P. P. Paskov, P. O. Holtz, G. Pozina, S. Kamiyama, M. Iwaya, H. Amano, and I. Akasaki; Phys. Status Solidi B **241**, 1124 (2004).

[2] C. K. Choi, Y. H. Kwon, B. D. Little, G. H. Gainer, and J. J. Song, Y. C. Chang, S. Keller, U. K. Mishra, and S. P. DenBaars, Phys. Rev. B **64**, 245339 (2001).

رقابت بازترکیبهای نوری و غیرنوری در چاه های کوانتومی چندگانه GaN /AlGa

هراتی زاده، حمید^{۱،۲}؛ اسمعیلی، مرتضی^۱؛ مونمار، بو^۲؛ آمانو، هیروشی^۳؛

^۱دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود

^۲انستیتوی فیزیک و تکنولوژی سنجش دانشگاه لینشوپینگ، لینشوپینگ، سوئد

^۳انستیتوی مهندسی برق و الکترونیک دانشگاه میجو، ناگويا، ژاپن

چکیده

رقابت فرآیندهای بازترکیب نوری و غیرنوری با مطالعه وابستگی دمایی زمان واهلش فوتولومینسانس در بازه دمایی $K=300-2$ برای دو نمونه از چاه های کوانتومی چندگانه $GaN/Al_xGa_{(1-x)}N$ ($x=0.07$) که یکی از آنها بدون آرایش و دیگری در ناحیه سد آرایش سیلیکونی یافته، مورد بررسی قرار گرفته است؛ و مشخص شد که در محدوده دماهای پایین مکانیسم بازترکیب تابشی غالب بوده و با افزایش دما مکانیسم بازترکیب غیرتابشی غالب خواهد شد. در این مطالعه نشان داده شده است که نمونه آرایش یافته با Si نسبت به نمونه بدون آرایش دارای بازترکیب تابشی قویتر بوده و مکانیسم بازترکیب تابشی در آن تا دمای بالاتری نسبت به بازترکیب غیرتابشی غالب می باشد.

The Competition Between the Radiative and Nonradiative Recombinations in GaN/AlGa

Hamid Haratizadeh^{1,2}; Morteza Esmaeili¹; B.Monemar²; H.Amano³;

¹Physics Department, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

²Department of Physics and Measurements Technology, Linköping University, Linköping, Sweden

³Department of Electrical and Electronic Engineering, Meijo University, Nagoya 468 Japan

Abstract

The competition between the radiative and nonradiative recombination processes has been studied by means of the temperature dependence of the time resolved photoluminescence (TRPL). The first sample is an undoped GaN/AlGa multiple quantum wells and the second one is a Si modulation-doped one with $9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ doping level. It has been determined that the radiative recombination (RR) mechanism dominates at the low temperature range and with increasing temperature the nonradiative recombination (NRR) will dominate. The results demonstrate that the radiative recombination channel is stronger in the Si doped sample, compared to the undoped one.

PACS No.78, 73

مقدمه

هستند، لذا برای اینکه عملکرد این قطعات را بهینه سازیم بایستی خواص اپتیکی و الکترونیکی این گروه از مواد و مکانیسم بازترکیب تابشی در این ساختارها به خوبی شناخته شود [۱،۲]. در این مقاله از روش فوتولومینسانس وابسته به زمان برای بررسی نوع مکانیسم بازترکیب در ساختارهای چاه های کوانتومی چندگانه GaN/AlGa (با هفت درصد آلومینیم) استفاده شده است. تکنولوژی نوری فوتولومینسانس ابزار قدرتمندی است که امکان

نیمه رسانا های نیتروژن دار و ساختارهای ناهمگونی که بر اساس این مواد و مخصوصاً GaN ساخته شده اند، به دلیل خصوصیات ویژه شان کاربردهای متعددی در ساخت قطعات اپتوالکترونیکی از جمله دیودهای نوری UV و مرئی و دیودهای لیزری و نیز ترانزیستورهای فرکانس بالا و قطعات توان پیدا کرده اند. به عنوان مثال چاههای کوانتومی چندگانه GaN/AlGa جزء سازنده اصلی معمول برای ناحیه فعال دیودهای نوری UV

مطالعه اپتیکی و درک نوع بازترکیبها و وابستگی دمایی وزمانی آنها در نانو ساختارهای کوانتومی فراهم می سازد.

نمونه ها و روش آزمایشگاهی

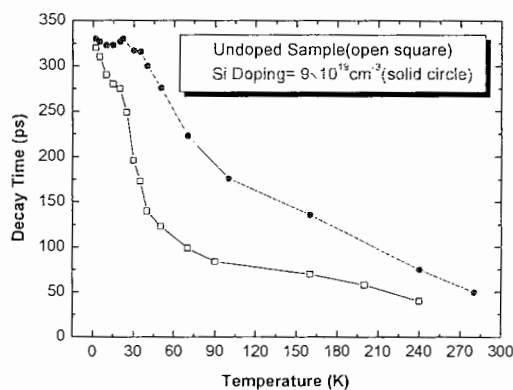
همه نمونه های مورد بررسی در راستای (۰۰۰۱) روی زیرلایه اکسید آلومینیم (Al_2O_3) به روش رسوب گذاری بخار شیمیایی (MOCVD) رشد داده شده اند [۲]. روی زیر لایه اکسید آلومینیم یک لایه AlN به ضخامت 20 nm و یک لایه GaN با فر بدون آرایش به ضخامت تقریبی $2\mu m$ رشد داده شده است. بر روی این لایه، ناحیه فعال که متشکل از لایه های گالیم نیتراید و آلومینیم گالیم نیتراید به تناوب و به تعداد ۵ لایه از هر یک و به ضخامت های به ترتیب 3 nm و 7 nm می باشند، رشد داده شده است. یکی از نمونه ها آرایش یافته و مقدار آرایش $(cm^{-3}) \times 10^{19}$ می باشد. آزمایشات فوتولومینسانس از دمای هلیوم مایع (2 K) تا دمای اتاق صورت گرفته است و نمونه در محفظه ای که دمای قابل تنظیم در محدوده $2-300$ کلوین داشت، قرار داده شده بود. برای آزمایش های فوتولومینسانس وابسته به زمان از هارمونیک سوم لیزر $Ti:Sapphire$ به عنوان منبع تحریک کننده استفاده شده است و برای آشکار سازی سیگنالهای وابسته به زمان فوتولومینسانس از سینکرواسکن هاماماتسو (Hamamatsu) با دقت زمانی بهتر از 10 ps استفاده شده است [۳].

نتایج و بحث

زمان واهلش فوتولومینسانس پیک چاه کوانتومی در دماهای مختلف برای دو نمونه بدون آرایش و آرایش یافته $((cm^{-3}) \times 10^{19})$ اندازه گیری شده و نمودار آن بر حسب دما در شکل ۱ رسم شده است. همانطوری که از شکل پیدا است، در دماهای پایین و برای آرایشهای سیلیکونی متفاوت زمان واهلش تقریباً یکسان است که علت آن جایگزیدگی حفره هاست [۴]. برای هر نمونه نیز زمان واهلش در دماهای پایین تقریباً ثابت است و علت آن بازترکیب تابشی اکسیتونهای جایگزیده می باشد. با افزایش دما به دلیل نقش غالب توسط بازترکیب های غیر تابشی

زمان واهلش تقریباً به صورت تابع نمایی کاهش پیدا می کند؛ یعنی بازترکیب های غیر تابشی سریعتر از بازترکیب های تابشی می باشند. در همه چاه های کوانتومی نیتروژندار این رفتار زمان واهلش بخاطر تغییر رژیم بازترکیب از، بازترکیب حاملها یا اکسیتونهای جایگزیده در دماهای پایین به بازترکیب حاملها یا اکسیتونهای آزاد در دماهای بالا می باشد [۵].

همانگونه که از شکل ۱ نمایان است زمان واهلش فوتولومینسانس از مقدار 320 ps در دمای 2 K به 40 ps در دمای 240 K در نمونه بدون آرایش کاهش می یابد. در یک گزارش که از نمونه های مشابه با نمونه های ما ولی با روش رشد MBE استفاده شده بود نتایج مشابه بدست آمده است [۶].



شکل ۱: نمودار وابستگی دمایی زمان واهلش فوتولومینسانس نمونه ها

در نمونه با آرایش خیلی زیاد در بازه دمایی $2-350\text{ K}$ افت وخیز کوچکی در زمان واهلش PL مشاهده می شود و در این نمونه زمان واهلش PL از مقدار 330 ps در 2 K به 50 ps در دمای 240 K کاهش می یابد. این بدین معنا است که زمان واهلش در نمونه با آرایش خیلی زیاد نسبت به نمونه بدون آرایش، کاهش کندتری بر حسب دما دارد (شکل ۱) که البته این نشانگر غالب بودن بازترکیب تابشی به بازترکیب غیرتابشی تا دماهای بالاتر در این نمونه می باشد. با استفاده از زمان واهلش اندازه گیری شده، $\tau_L(T)$ ، و شدت کل فوتولومینسانس، $I_L(T)$ ، استفاده از رابطه های زیر می توانیم زمانهای بازترکیب تابشی و غیر تابشی را محاسبه کنیم.

میشود که تا حدود دمای ۷۰ K، مکانیسم بازترکیب تابشی غالب است و در دماهای بالاتر از آن ($T > 70$ K) مکانیسم بازترکیب غیر تابشی غالب می شود. بایستی توجه شود که علاوه بر تشکیل یک گاز الکترونی دو بعدی (که از آلایش سیلیکونی در سدهای AlGaIn نشأت می گیرد) در نمونه با آلایش زیاد علت غالب شدن مکانیسم بازترکیب غیر تابشی در دماهای بالاتر از ۷۰ K، وجود نقایص ساختاری فراوان می باشد. همچنین مشاهده می شود که در نمونه های آلایش یافته با Si نسبت به نمونه بدون آلایش بازترکیب تابشی به طرز محسوسی قویتر است.

نتیجه گیری

مطالعه اپتیکی نمونه های موجود معین کرد که اولاً در دماهای خیلی پایین (تقریباً ۲ K) زمان واهلش برای آلایش های متفاوت سیلیکونی تقریباً یکسان است که این ناشی از مکانیسم مشابه برای فرآیند بازترکیب نوری در نمونه ها است و ثانیاً با افزایش دما زمان واهلش کاهش می یابد که میزان این کاهش با افزایش آلایش سیلیکونی کند می گردد، به طوریکه در نمونه بدون آلایش تا دمای ۳۰ K و در نمونه با آلایش خیلی زیاد تا دمای تقریباً ۷۰ K مکانیسم بازترکیب تابشی نقش غالب را خواهد داشت و همچنین میزان تابش گسیلی با حضور آلایش افزایش می یابد.

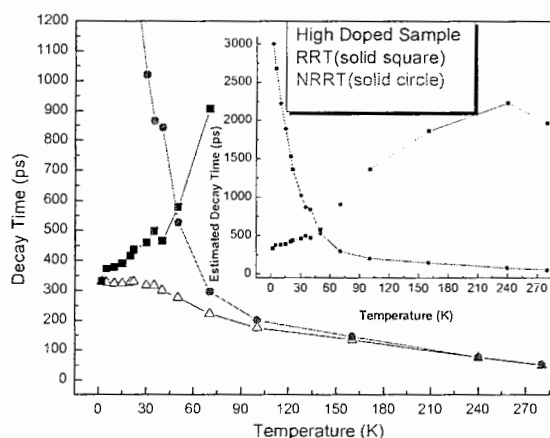
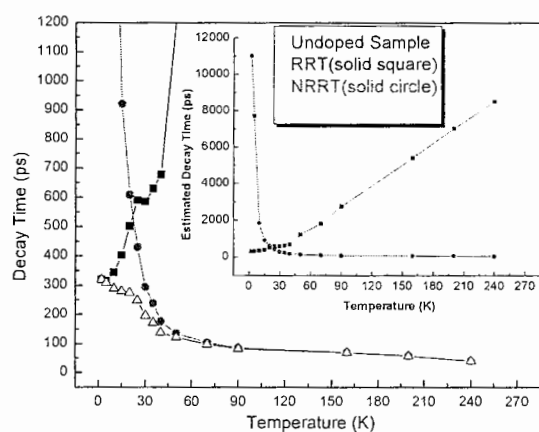
مراجع

- [۱] S.Nakamura, M.Senoh, N.Iwasa, S.Nagahama, T.Yamada, and T.Mukai; *J.Appl. Phys.*, part 2 **34**, L1332(1995).
- [۲] H.Haratzideh, B.Monemar, P.P.Paskov, J.P.Bergman, B.E.Sernelius, P.O.Holtz, M.Iwaya, S.Kamiyama, H.Amano, and I.Akasaki; *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 5071
- [۳] H.Haratzideh, B.Monemar, P.P.Paskov, P.O.Holtz, G.Pozina, S.Kamiyama, M.Iwaya, H.Amano, and I.Akasaki; *Phys. Status. Sol. B* **241** (2004) 1124.
- [۴] H.Haratzideh, P.P.Paskov, G.Pozina, P.O.Holtz, B.Monemar, S.Kamiyama, M.Iwaya, H.Amano, and I.Akasaki; *Appl. Phys. Lett.* **80**, 1373 (2002)
- [۵] P.Lefebvre, S.Anceau, P.Valvin, T.Taliercio, L.Konczewicz, S.P.Lepkowski, et. al.; *Phys. Rev. B* **66**, 195330 (2002)
- [۶] P.Lefebvre, J.Allegre, B.Gil, H.Mathieu, N.Gradjean, M.Leroux, J.Massies, and P.Bigenwald; *Phys. Rev. B* **59**, 15363 (1999)

$$\tau_R(T) = \tau_L(T) I_L(0) / I_L(T) \quad (1)$$

$$\tau_{NR}(T) = \tau_L(T) I_L(0) / [I_L(0) - I_L(T)] \quad (2)$$

فرض اساسی در این محاسبه آن است که در دماهای پایین بازترکیب ۱۰۰٪ تابشی است.



شکل ۲: مقادیر اندازه گیری شده زمان واهلش (مثلثهای تو خالی) و مقادیر محاسبه شده زمانهای بازترکیب تابشی، τ_R ، و غیرتابشی، τ_{NR} ، در دماهای مختلف برای نمونه بدون آلایش (تصویر بالا) و نمونه با آلایش (تصویر پایین)،

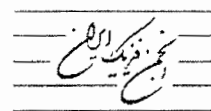
زمان واهلش بازترکیب تابشی و غیر تابشی برای دو نمونه مورد بررسی بر حسب دما در شکل ۲ رسم شده است. مشاهده می شود که در نمونه بدون آلایش تا حدود دمای ۳۰ K بازترکیب تابشی غالب است و در دماهای بالاتر از ۳۰ K ($T > 30$ K) بازترکیب غیرتابشی غالب می شود. همچنین برای نمونه آلایش یافته دیده



سال جهانی فیزیک ۱۳۸۴
WORLD YEAR OF PHYSICS - IRAN 2005

کنفرانس فیزیک ایران

۷ تا ۱۰ شهریور ۱۳۸۴
خرم آباد، دانشگاه لرستان



رقابت حامل های نوری و آلایش سیلیکونی در استتار میدان های قطبشی در چاه کوانتمی GaN

صابونی، محمود^۱؛ اسمعیلی، مرتضی^۱؛ هراتی زاده، حمید^{۱،۲}؛ مونمار، بو^۲؛ آمانو، هیروشی^۳

^۱دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود، بلوار دانشگاه، شاهرود، ایران

^۲انستیتوی فیزیک و تکنولوژی سنجش دانشگاه لینشوپینگ، لینشوپینگ، سوئد

^۳انستیتوی مهندسی برق و الکترونیک دانشگاه میجو، ناگويا، ژاپن

چکیده

در این مقاله، با اندازه گیری طیف فتولومینسانس وابسته به زمان (دینامیک بازترکیب) یکسری از چاه های کوانتومی نیتروژن دار GaN/AlGaIn با چگالی آلایش سیلیکونی متفاوت، تاثیر حامل های آلایشی و همچنین حامل های نوری را در استتار میدان های قطبشی داخلی پیزوالکتریک و خود به خودی بررسی کرده ایم. اندازه گیری طیف فتولومینسانس وابسته به زمان چاه های کوانتومی با آلایش و بدون آلایش نشان دهنده جابجایی های در حدود چند میلی الکترون ولت در محل پیک انرژی گسیلی این چاه ها می باشد. علت این جابجایی، تغییرات زمانی میزان استتار میدان های قطبشی داخلی ناشی از کاهش زمانی تعداد حامل های نوری می باشد. با افزایش چگالی آلایش نقش حامل های ناشی از آلایش سیلیکونی بر حامل های نوری غلبه کرده و در چگالی های آلایشی بالا عمداً کاهش انرژی در محل پیک انرژی گسیلی چاه کوانتومی در نمونه آلایش یافته مشاهده نمی شود.

Competition of the Photo-Generated Carriers and the Si Doping Level on the Screening of the Internal Polarization Fields of the GaN Quantum Well

Esmaili, Morteza¹; Sabooni, Mahmood¹; Haratizadeh, Hamid^{1,2}; Monemar, Bo²; Amano, Hiroshi³

¹Physics Department, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

²Department of Physics and Measurements Technology, Linköping University, Linköping, Sweden

³Department of Electrical and Electronic Engineering, Meijo University, Nagoya 468 Japan

Abstract

The competition between the photo-generated carriers and the Si doping level on the screening of the internal polarization fields in modulation-doped GaN/Al_{0.07}Ga_{0.93}N multiple-quantum-well (MQW) structures were studied by means of photoluminescence (PL) and time-resolved PL measurements. Undoped and low-doped samples indicate a QW emission, which is red shifted by a few meV during the first 600 ps in time delayed spectra due to the screening of the internal polarization fields, but there is almost no shift for the medium and high doped samples because of the competition between the photo-generated carriers and Si doping level is dominated by the extrinsic carriers in the medium and high doped samples.

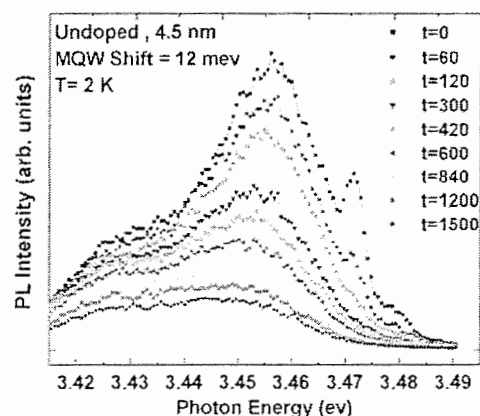
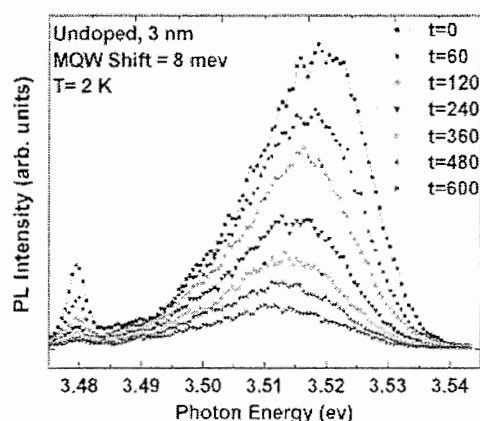
PACS No. 78, 73

مقدمه

نورگسیلنده فراینش و آبی و دیودهای لیزری و همچنین ساخت وسایلی که در فرکانس های بالا و دماهای بالا کارایی دارند، در چند سال اخیر مطالعات زیادی روی آنها انجام گرفته است. اکثر این وسایل از ساختار چاه های کوانتمی چندگانه و سایر

نیم رساناهای نیتروژن دار (گروه III-Nitride) اخیراً بطور فرآیندهای مورد توجه محققان قرار گرفته است. به علت کاربردهای مهم آنها در ساخت وسایلی از قبیل دیودهای

سمت آبی (انرژی های بیشتر) در نمونه ۳nm خواهد داشت که علت آن اثر محدودیت کوانتومی می باشد. البته در نمونه با پهنای چاه ۴/۵nm بیک فتولومینسانس چاه کوانتومی نسبت به GaN کپه ای شیفی به اندازه ۲۷ meV به سمت قرمز (انرژی های کمتر) دارد. علت آن، بیشتر شدن ضخامت چاه از ضخامت بحرانی نمونه است. که باعث می شود اثر کوانتومی استارک ناشی از میدان های داخلی پیزوالکتریک و خودبخودی بر اثر ناشی از محدودیت کوانتومی غلبه کند.



شکل ۱: طیف فتولومینسانس وابسته به زمان نمونه های با پهنای چاه ۴/۵nm و ۳nm که بدون آلایش هستند.

برای بررسی بازدهی استار میدان های قطبشی داخلی توسط حامل هایی که از آلایش در سدها نتیجه می شوند و همچنین بررسی چگونگی تغییرات استار توسط حامل های نوری نمونه ها در طی

نانوساختارها در ناحیه فعال خود بهره می برند. یکی از ویژگی های نیم رساناهای با ساختار ورتسایت وجود بارهای قطبشی در سطوح مشترک این ساختارهاست که باعث به وجود آمدن میدان های قطبشی داخلی بزرگ در این ساختارها می شود، و این به نوبه خود باعث تاثیر روی مکانیزم بازترکیب تابشی خواهد شد. یکی از ابزارهای بررسی اثر این میدان ها، مشاهده طیف فتولومینسانس وابسته به زمان این نمونه ها می باشد [۱]. این کار که روی یک سری از همین نانوساختارهای کوانتومی نیتروژن دار انجام شده است، نقش حامل های نوری و حامل های ناشی از آلایش سیلیکونی و رقابت آنها را در استار میدان های قطبشی داخلی، ناشی از عدم تقارن بلور و ناهمسانی شبکه های لایه و زیرلایه در یکسری از چاه های کوانتومی GaN/AlGaIn در دماهای پایین با استفاده از روش آزمایشگاهی فتولومینسانس وابسته به زمان بررسی می کند.

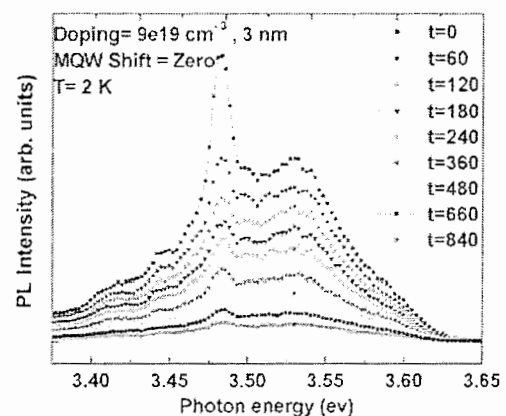
روش آزمایشگاهی و نمونه ها

نمونه های بحث شده در این مقاله به روش رسوب گذاری بخار شیمیایی و روی زیر لایه اکسید آلومینوم رشد یافته اند. ناحیه فعال شامل چاه های کوانتومی پنج گانه می باشد که ضخامت چاه های GaN، ۳nm و ۴/۵nm و ضخامت سدهای AlGaIn، ۷nm است. یکسری از نمونه ها با پهنای چاه ۳nm توسط سیلیکون اضافه شده در سد AlGaIn آلایش یافته اند و مقدار آلایش در آنها بین $3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ و $9 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ می باشد. برای آزمایش های فتولومینسانس وابسته به زمان از هارمونیک سوم لیزر پالسی Ti:Sapphire با طول موج ۲۶۶ nm به عنوان منبع تحریک کننده و برای آشکارسازی سیگنال های وابسته به زمان فتولومینسانس از سینکرواسکن هاماماتسو استفاده شده است. تمامی آزمایش ها در دمای هلیوم مایع (۲ K) انجام شده است.

نتایج و بحث

همانطوری که در گزارش های قبلی بیان شد، بیک فتولومینسانس چاه های کوانتومی چندگانه GaN/AlGaIn نسبت به بیک فتولومینسانس حاصل از GaN کپه ای یک جابجایی به

زمان از روش فتولومینسانس وابسته به زمان (TRPL) استفاده شده است. در شکل ۱ طیف فتولومینسانس وابسته به زمان برای دو نمونه $4/5 \text{ nm}$ و 3 nm نشان داده شده است و اندازه گیری های انجام شده (دمای 2 K) نشان دهنده یک شیفیت به سمت قرمز به اندازه 8 meV در طی 600 ps اولیه طیف فتولومینسانس زمانی و 12 meV در طی 1500 ps اولیه طیف فتولومینسانس زمانی به ترتیب برای نمونه های 3 nm و $4/5 \text{ nm}$ می باشد. این شیفیت برای نمونه $4/5 \text{ nm}$ در 600 ps اولیه در حدود 8 meV می باشد. دلیل این شیفیت کاهش تعداد حامل های نوری با گذشت زمان و در نتیجه کاهش استتار میدان های قطبشی داخلی با گذشت زمان می باشد که باعث افزایش اثر کوانتومی استارک می شود؛ همچنین در شکل افزایش پهنای خط گسیلی با گذشت زمان به وضوح دیده می شود. در شکل ۲ طیف فتولومینسانس وابسته به زمان ناشی از نمونه با پهنای چاه 3 nm که دارای آلایش های سیلیکونی $(9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3})$ است، بررسی و با نمونه بدون آلایش مقایسه شده است.



شکل ۲: طیف فتولومینسانس وابسته به زمان نمونه با پهنای چاه 3 nm که به میزان $(9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3})$ آلایش یافته است.

در مورد نمونه بدون آلایش همانطوری که در بالا گزارش شد شیفیتی به اندازه 8 meV در طیف فتولومینسانس دیده می شود در حالی که برای همین نمونه با آلایش سیلیکونی $(9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3})$ این شیفیت به اندازه 3 meV خواهد بود (شکل ۳) برای آلایش $(9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3})$ نشان داده نشده است) و با اندازه گیری

مشخص میشود که در نمونه با آلایش خیلی زیاد $(9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3})$ هیچ شیفیتی در پیک فتولومینسانس حاصل از چاه های کوانتومی دیده نمی شود. در توضیح علت این موضوع باید بگوییم که برای برانگیختگی نمونه ها از لیزری که دارای مشخصات $f = 250 \text{ KHz}$ و $\tau_0 = 200 \text{ fs}$ و توان برانگیختگی 20 mW و قطر لکه لیزر $100 \mu\text{m}$ استفاده شده است؛ و با فرض اینکه ضریب جذب در طول موج برانگیختگی $(10^{19} \text{ cm}^{-3})$ باشد [۲]، با یک محاسبه سر راست، ماکزیمم حامل های نوری $9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ خواهد بود که به وضوح از تعداد حامل های ناشی از آلایش در سدها، در نمونه های با آلایش متوسط و بالا کمتر است. لذا در نمونه های با آلایش متوسط و بالا، نقش عمده در استتار کردن میدان های داخلی با حامل های ناشی از آلایش در سدها می باشد و با گذشت زمان، کاهش حامل های نوری تاثیری در مقدار استتار کردن میدان های داخلی نخواهد داشت و شیفیتی را که در نمونه های بدون آلایش و آلایش پایین دیدیم، در مورد نمونه های با آلایش سیلیکونی بالا نخواهیم دید.

نتیجه گیری

استفاده از حامل های خارجی که توسط آلایش در سیستم قابل ایجاد هستند، برای استتار میدان های پیزوالکتریک داخلی و در نتیجه حذف اثر کوانتومی استارک موثرتر می باشد و باید آلایش را اولاً در داخل سد تزریق نمود تا از حضور یون های سیلیکون در داخل چاه جلوگیری گردد و ثانیاً میزان چگالی آلایش به نحوی محاسبه گردد که در فرآیندهای بازترکیب وابسته به زمان، حامل های نوری تاثیری بر انرژی گسیلی از قطعه اپتوالکترونیکی نداشته باشد.

مراجع

- [۱] B. Monemar, H. Haratizadeh, P. P. Paskov, G. P. Pozina, P. O. Holtz, J. P. Bergman, S. Kamiyama, M. Iwaya, H. Amano, and I. Akasaki, Phys. Stat. Sol.(b) 237, 353-364 (2003).
- [۲] J. F. Muth, J. D. Brown, M. A. I. Johnson, Zhonghai Yu, R. M. Kolbas, J. W. Cook, and J. F. Schetzina, MRS Internet J. Nitride Semicond Res. 4S1, G5.2 (1999).

Effect of the extrinsic and temporal carriers on radiative recombination of III-nitride nanostructures

M. Esmaili¹; H. Haratizadeh^{1, 2}; B. Monemar²

¹Physics Department, Shahrood University of Technology, 3619995161, P.O. Box 316, Shahrood, Iran

²Department of Physics and Measurements Technology, Linköping University, 581 83 Linköping, Sweden

Email: hamha@walla.com

Abstract

Due to many important applications, the group III-Nitride semiconductors have recently attracted remarkable attention among the semiconductor researchers and engineers. In this paper, we report on the impact of the extrinsic and temporal carriers on the screening of the polarization internal fields. The optical efficiency of GaN/AlGaIn multiple quantum well (MQW) nanostructures were studied by means of photoluminescence (PL) and time-resolved PL measurements. Extrinsic carriers come from Si doping in the barriers while temporal carriers originate when the samples are excited by the laser beam. The emission peaks of MQWs in PL spectra of the undoped and low-doped samples show a shift towards higher energy levels as excitation intensity increases, while the other samples do not exhibit such a phenomenon due to the dominance of the extrinsic carriers. The transient data confirm the results of the PL measurements.

Keywords- Photoluminescence (PL), GaN/AlGaIn multi quantum well, Time Resolved PL (TRPL), Polarization fields, Exciton, Nanostructures, III-Nitride semiconductors, quantum well

1. Introduction

III-nitride material family, especially GaN, attracted much interest during the last few years. These are particularly well suited for optoelectronic applications, e.g. as UV light emitters in the lighting solutions that are expected to replace today's incandescent and fluorescent lamps. Some other applications include laser diodes (LDs) as well as high temperature and high power electronic devices [1, 2]. In order to optimize the function of such devices, we need to improve our knowledge of the material properties and especially to understand the recombination mechanisms in III-nitride QWs. A peculiarity of the nitrides is the significant macroscopic polarization with both spontaneous and

piezoelectric components [3, 4]. These polarization charges create internal fields in the QWs that have fundamental influence on the optical properties, strongly affecting the oscillator strengths of excitons and the spectral position of the corresponding photoluminescence (PL) peaks. The radiative recombination processes are intensely modified by these built-in electric fields in the [0001] direction, which result in a substantial quantum confined stark effect (QCSE). Screening by doping (extrinsic carriers) and/or photo-generated carriers (temporal carriers), strongly affects the polarization-induced properties [5]. The modulation doping technique (doping in the barriers) can be used to screen the macroscopic polarization fields in the nitride quantum wells. The screening of the fields increases the overlap between the confined electron and hole wave functions, enhancing the radiative transition probability across the gap.

In this paper, we discuss some recent results of MOCVD grown GaN/AlGa_N MQWs nanostructures, all grown without an additional capping layer. In addition to the polarization fields inside the MQWs, the influence of the outer surface in the absence of the capping layer is, indeed, present.

2. Samples and experimental procedure

A set of GaN/AlGa_N MQW structures with Si doping concentration in the range of nominally undoped (with a residual donor doping of about $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) up to $9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ doping level in the AlGa_N barriers has been studied by means of PL and time-resolved PL (TRPL) [see table1]. The MQW structures were grown on (0001) sapphire substrates by means of metal organic chemical vapor deposition (MOCVD) [6].

On top of the substrate, an AlN layer with a thickness of 20 nm and a thick nominally undoped GaN buffer layer of about 2 μm were grown. This was followed by a multiple quantum well structure with

five-period of 3 nm wide GaN quantum well layers separated by 7 nm wide $\text{Al}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{N}$ barriers (Fig. 1). No additional capping layer was used so that the outermost QW barrier faces the surface.

Optical measurements have been undertaken by means of PL and TRPL techniques at IFM institute of Linköping University, Sweden. For optical excitation in the PL measurements, we have used the fourth harmonic of a Nd:Vanadate laser with a wavelength of 266 nm. The PL signal was dispersed by a single-grating monochromator and detected by a UV enhanced liquid nitrogen cooled CCD camera. For the transient PL data, we used the third harmonic ($\lambda_{\text{exc}} = 266 \text{ nm}$) of a Ti: sapphire femto-second pulsed laser. The PL transients were detected either by a UV sensitive Hamamatsu streak camera system with a temporal resolution better than 10 ps. The samples were then placed in a variable temperature cryostat for measurements at low temperature (2 K).

3. Results and discussion

As we mentioned in our previous reports, [7, 8] existence of polarization fields in III-nitrides QWs is a well-known concept. The abrupt variation of the polarization at surfaces and interfaces gives rise to large polarization sheet charges that in turn create huge internal electric field of the order of MV/cm. The piezoelectric (P_{pz}) and spontaneous (P_{sp}) polarizations in GaN well layers for the undoped sample have been estimated at about $0.002 \text{ (C/m}^2\text{)}$ and $-0.034 \text{ (C/m}^2\text{)}$, respectively [7] and the total internal polarization field (E_{w}) has been calculated -0.48 (MV/cm) . The internal field in the growth direction causes band bending and forces the electrons and holes to the opposite side of the well and decreases the overlap of the electron-hole wave functions, resulting in the reduction of the transition probability. In addition, the internal polarization field reduces the energy emission of the recombination, leading to a red shift on the PL peak position (Fig. 2). This well known effect is referred to as the Quantum Confined Stark Effect (QCSF).

The cw PL spectra of GaN/AlGaN MQW with different doping level measured at $T=2$ K reveals a blue shifted broad QW emission with respect to the 3.48 eV PL peak from the GaN buffer layer due to the quantum confinement. The PL spectra for undoped and heavy-doped samples (samples No.1, 6) can be seen in Fig.3. The QW emission is attributed to excitons localized at the energy minima induced by well width fluctuations [9]. The internal field is screened more efficiently by increasing the doping level, consequently the QCSF is reduced and the QWs peak shifts to higher energies.

The integrated PL spectra of the samples at low temperature clearly indicates that the enhancement of the optical efficiency in heavy-doped sample corresponds to the undoped one (Fig. 3), which can be explained if we take into account the more effective screening of the internal polarization fields of the doped samples by the electrons originating from the doping in the barriers. Screening of the fields increases the overlap between confined electron and hole wave functions and the optical efficiency enhances with increasing the modulation doping [9].

The outermost barrier (outermost AlGaIn layer) faces the surface. Therefore the QWs will experience a strong depletion field [10], which is also expected to vary strongly between the different QWs in the MQW region. Fig.4 shows the variation of the full width at half maximum (FWHM) of the QW peak versus the doping level. FWHM increases by increasing the doping level, which can be explained by varying the internal polarization fields due to the variation of the depletion fields in different samples as well as the large contribution of structural defects induced by high Si doping and nonuniform absorption of the excitation energy at different QWs. FWHM in the undoped sample is 23 meV, comparable with similar GaN/AlGaIn QWs structures grown by molecular beam epitaxy (MBE), exhibiting a typical FWHM of about 20–25 meV [11], which is shown that the quality of our MOCVD grown samples is comparable with the best MBE grown ones .

The PL temporal response has been evaluated at the PL peak position for undoped and heavy-doped ($9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) samples at different excitation power (Fig. 5). The PL decay time corresponding to the stronger excitation regimes in the undoped sample is faster than the corresponding one for the weaker excitations and the PL transient curves show a non-exponential behavior at different excitation powers (Fig. 5a). The faster part of the PL transient in the undoped sample decreases from 360 ps at the lowest excitation intensity to 260 ps at the highest one. This part of the PL decay curve is attributed to the relaxation time for the excitons to relax to the localization centers. By increasing the excitation intensity the photo-generated carriers/exciton density will increase and partly screen the localization potentials. In the case of the undoped sample, the built-in electric fields are more effectively screened in the stronger excitation regime, photo-generated carriers recombine more quickly and the slower part of the PL decay time curves becomes faster. But for the case of the heavy doped sample, free carriers originating from the modulation doping effectively screen the built-in electric fields and the photo-generated carriers recombine at nearly flat band condition. In the case of heavy-doped sample, the extrinsic carrier density is much higher than the photo-generated density [12] and a large number of free electrons; originating from the barrier doping, are available to recombine with the localized holes even at a low excitation power. Then the PL transient curves show a mono-exponential behavior with a nearly similar decay time at different excitation intensity.

Effect of the screening of the polarization fields by the extrinsic carriers originating from the Si doping in the barriers can in principle be verified by PL measurements. Fig. 6 shows the PL spectra of undoped, low doped and heavy samples at different excitation powers at $T=2 \text{ K}$. These data show that with decreasing excitation intensity from 100% to 0.002%, the PL peak position of the undoped and low doped samples red shifted about 3.8 meV and 1 meV respectively, but there is no shift for the heavy-doped sample.

This behavior can be explained in terms of the screening of the internal fields by the photo-generated carriers and the relaxation rate to lower energy states in the undoped and low-doped samples. As we reported before, the maximum photo-generated carrier concentration ($2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) is less than the extrinsic carrier concentration originating from the doping in the barriers in the medium and heavy doped samples [12], which means that the extrinsic carriers dominate in the medium and heavy doped samples, and the photo-generated carriers have accordingly a small influence on the electron concentration, consistent with the transient PL data (Fig. 5).

4. Summary and conclusions

The screening effect of the internal polarization fields due to the Si modulation doping, on the PL radiative recombination dynamic and optical efficiency of GaN/AlGaIn multi quantum wells nanostructures has been investigated by means of photoluminescence and time resolved PL spectroscopy. We found that the screening of the internal polarization fields increases the overlap between the confined electron and hole wave functions therefore enhancing the optical efficiency. By decreasing the excitation power due to the less screening of the internal polarization fields by the temporal carriers (photo generated carriers), the stationary PL data reveals a red shifted QW emission for the undoped and low-doped samples. But there is almost no shift for the medium and heavy doped samples due to the most effectively screening of the internal fields by the extrinsic carriers originated from the modulation Si doping. The faster part of the PL transient in the undoped sample decreases with increasing excitation intensity but in heavy doped sample decay time is nearly constant at different excitation intensity due to the screening the internal fields by the extrinsic carriers.

Acknowledgments

The authors would like to thank Prof. Hiroshi Amano and his co-workers at Meijo University of Japan for providing samples as well as Prof. Per Olof Holtz, Dr. Pelamen P. Paskov and Prof. Peder Bergman at Linköping university of Sweden for their clarifying discussions.

REFERENCES

1. Nakamura, S., Fasol, G., The Blue Laser Diode: GaN based Light Emitters and Lasers, Springer, Berlin, (1997).
2. Nakamura, S., Senoh, M., Iwasa, N., Nagahama, S., Yamada, T., Mukai, T., Jpn J.Appl.Phys. **34**, P. L1332 (1995).
3. Fiorentini, V., Bernardini, F., Della Sala, F., Di Carlo, A., Lugli, P., Effects of macroscopic polarization in III-V nitride multiple quantum wells, *J. Phys. Rev. B* **60**, P. 8849 (1999).
4. Bernardini, F., Fiorentini, V., Vanderbilt, D., Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides, *J. Phys. Rev. B* **56**, P. R10024 (1997).
5. Di Carlo, A., Della Sala, F., Lugli, P., Fiorentini, V., Bernardini, F., Doping screening of polarization fields in nitride heterostructures, *J. Appl. Phys. Lett.* **76**, P. 3950 (2000).
6. Amano, H., Sawaki, N., Akasaki, I., Toyoda, Y., *J. Appl. Phys. Lett.* **48**, P. 35 (1986).
7. Esmaeili, M., Haratizadeh, H., Monemar, B., Kamiyama, S., Doping screening of the internal Polarization fields of the GaN/AlGa_{0.07}N MQWs, Proc. of the 11th Annual IASBS meeting on condensed matter physics, Zanjan, Iran, P. 9 (2005).
8. Sabooni, M., Esmaeili, M., Tabasi, F., Haratizadeh, H., Monemar, B., Amano, H., Dynamical Study of the Radiative Recombination processes in GaN/Al_{0.07}Ga_{0.93}N MQWs, Proc. of 6th ICNS, Bremen University, Germany, Tu-P-128(2005).

9. Haratizadeh, H., Paskov, P. P., Pozina, G., Holtz, P. O., Monemar, B., Kamiyama, S., Iwaya, M., Amano, H., Akasaki, I., Effect of n-type modulation doping on the photoluminescence of GaN/Al_{0.07}Ga_{0.93}N multiple quantum wells, *J. Appl. Phys. Lett.* **80**, P. 1373 (2002).
10. Monemar, B., Haratizadeh, H., Paskov, P. P., Pozina, G., Holtz, P. O., Bergman, J. P., Kamiyama, S., Iwaya, M., Amano, H., Akasaki, I., Influence of polarization fields and depletion fields on photoluminescence of AlGaIn/GaN multiple quantum well structures, *J. Phys. Stat. Sol. (b)* **237**P. 353 (2003).
11. Leroux, M., Grandjean, N., Laugt, M., Massies, J., Gil, B., Lefebvre, P., Bigenwald, P., Quantum confined Stark effect due to built-in internal polarization fields in (Al,Ga)N/GaN quantum wells, *J. Phys. Rev. B* **58**, P. R13371(1998).
12. Sabooni, M., Esmaili, M., Haratizadeh, H., Monemar, B., Amano, H., Competition of the Photo-generated carriers and the Si doping level on the screening of the internal polarization fields of the GaN/AlGaIn Quantum Wells, Proc. of the Annual Physics Conference of Iran, Lorestan University, Iran, (2005).

Table 1. Detailed description of samples

Sample	Si Doping (cm ⁻³)	Well Width (nm)	Barrier width (nm)	Composition x
1	Undoped	3.0	7.2	~0.07
2	3.0×10^{18}	3.0	7.2	~0.07
3	6.0×10^{18}	3.1	7.6	~0.07
4	2.4×10^{19}	3.0	7.4	~0.07
5	4.2×10^{19}	3.1	7.5	~0.07
6	9.0×10^{19}	3.0	7.0	~0.07

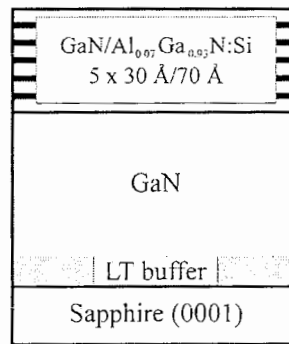


Fig. 1. Schematic picture of the structure of the GaN/AlGaIn MQW samples. The dimensions and compositions are approximate.

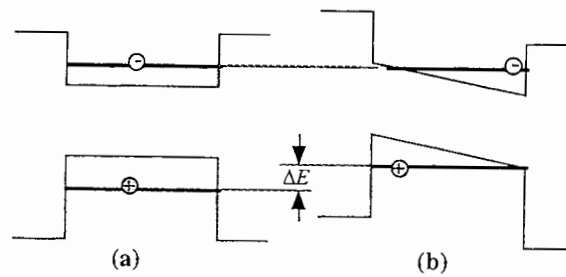


Fig. 2. (a) An unperturbed QW (b) A QW affected by the internal polarization field. The energy bands will be tilted and the carriers tend to become localized at the opposite interfaces. The reduction ΔE of the recombination energy is called the quantum confined Stark shift

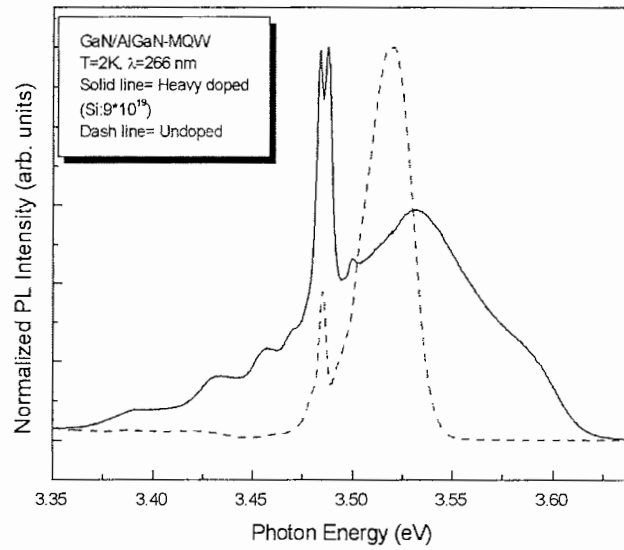


Fig. 3. PL spectra of undoped and heavy doped samples at 2 K (clearly the optical efficiency in heavy doped sample is higher than the undoped one)

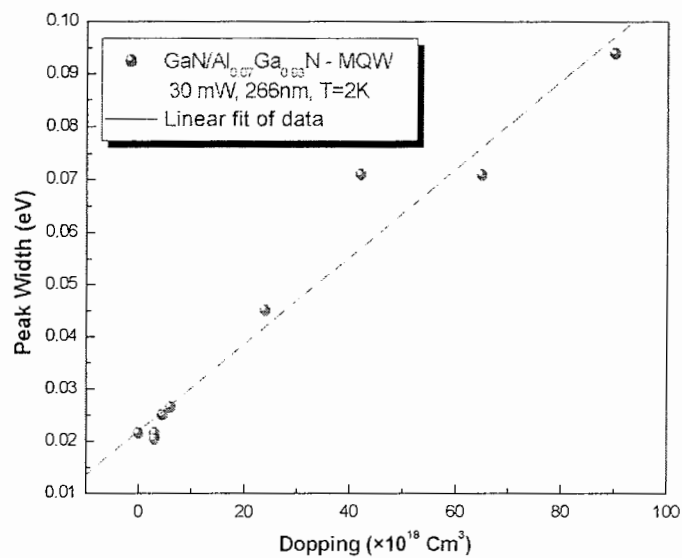


Fig. 4. Si doping dependence of the MQWs photoluminescence peak width (FWHM), measured at T=2 K

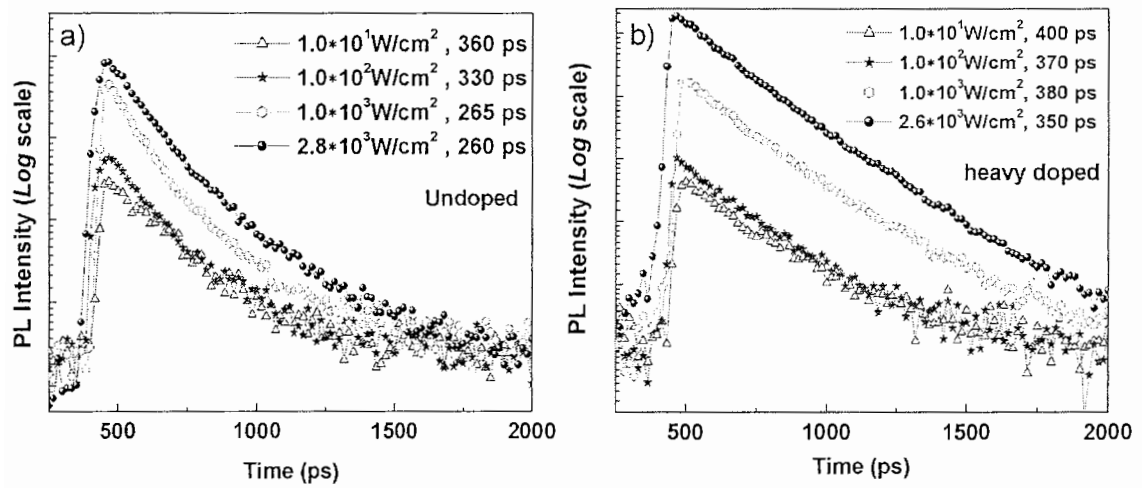


Fig. 5. (a) The time decay corresponding to the stronger excitation regimes in the undoped sample is faster than the corresponding one for weaker excitations. (b) The PL transient curves of the highest doped sample show almost same decay time at different excitation intensity powers

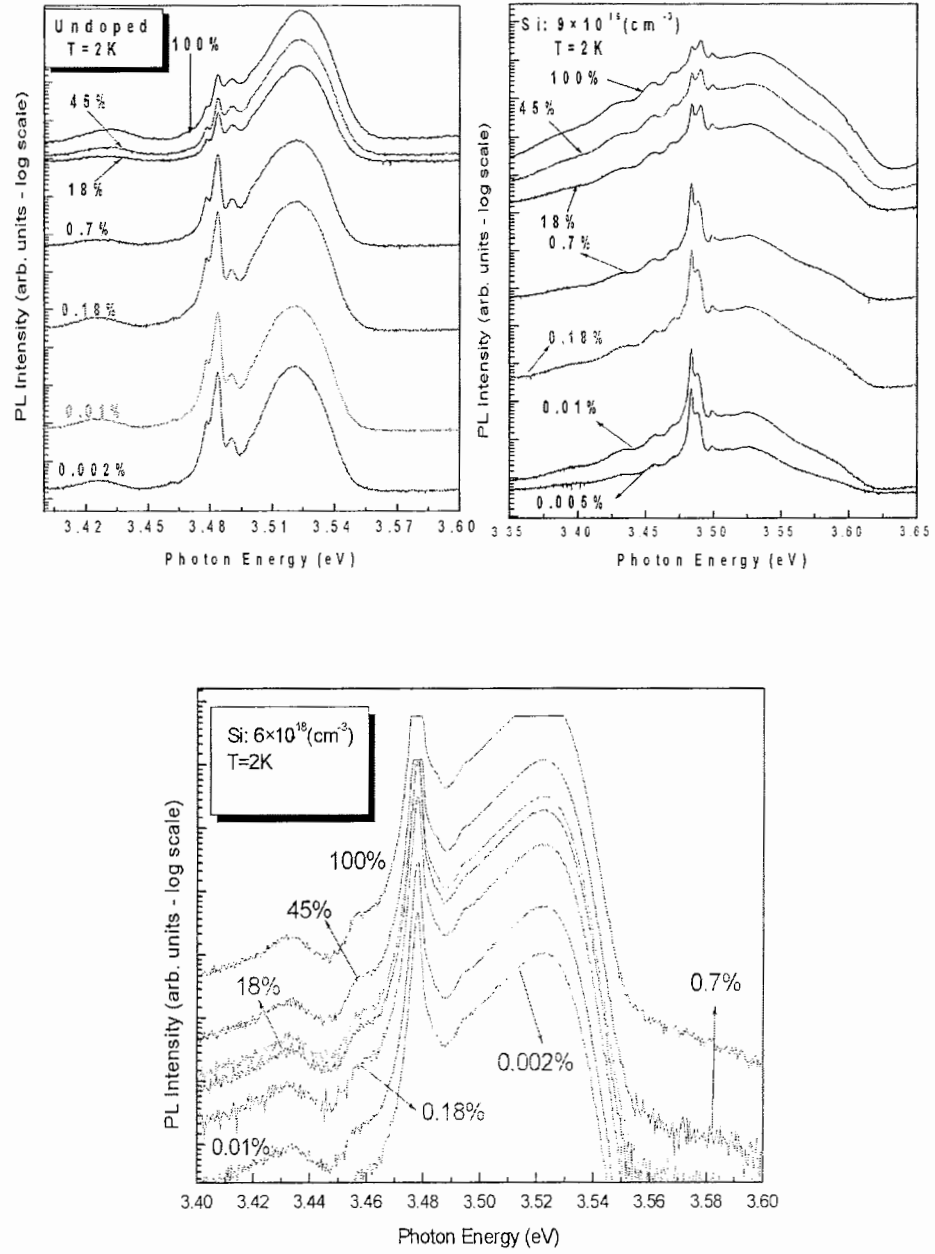


Fig. 6. PL spectra of the emission peaks for the undoped and the low doped samples show a clear red shift with the decreasing excitation power (3.8 meV for undoped, 1 meV for low doped samples), but there is no shift for heavy doped sample.

تأثیر حامل های ذاتی و نوری بر روی باز ترکیب نوری نانوساختارهای تری نیتراید

اسمعیلی^۱، مرتضی؛ هراتی زاده^{۱،۲}، حمید؛ مومناز^۲، بو

۱. دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود، بلوار دانشگاه، شاهرود، ایران
۲. انستیتوی فیزیک و تکنولوژی سنجش دانشگاه لیشوپینگ، لیشوپینگ، سوئد
پست الکترونیکی: hamha@walla.com

واژه های کلیدی: فوتولومینسانس، چاه های کوانتومی چندگانه GaN/AlGaN، فوتولومینسانس وابسته به زمان، میدان های

قطبشی، اکسیژن، نانوساختارها، نیمه هادیهای نیتروژندار

چکیده

ما در این مقاله با اندازه گیری طیف فوتولومینسانس و فوتولومینسانس وابسته به زمان یکسری از نانوساختارهای نیتروژندار (چاه های کوانتومی نیتروژن دار GaN/AlGaN)، تاثیر افزایش آلایش سیلیکونی (که در ناحیه سد انجام گرفته) و همچنین شدت نور باریکه لیزر فرودی بر روی نمونه را در استتار میدان های قطبشی داخلی موجود در این ساختارها، طیف فوتولومینسانس این نمونه ها و همچنین زمان واهلش حامل ها در این ساختارها بررسی کرده ایم. اندازه گیری های ما نشان می دهد که با افزایش آلایش سیلیکونی پهنای پیک حاصل از گسیل انرژی از ناحیه چاه های کوانتومی و همچنین بازدهی نوری سیستم به علت استتار میدان های الکتریکی موجود در چاه های کوانتومی و کاهش اثر کوانتومی محدود شده استارک، افزایش پیدا می کند و این موضوع در طراحی دیودهای

نورگسیلنده که در ناحیه فرابنفش تابش می کنند از اهمیت بالایی برخوردار است. همچنین اندازه گیری های ما نشان می دهد که پیک انرژی گسیلی این چاه ها با افزایش شدت نور لیزر به علت استار موثرتر میدان های الکتریکی داخلی موجود در این ساختارها به سمت انرژی های بیشتر، در حدود چند میلی الکترون ولت، جابجا می شود. در این مقاله با استناد به داده هایمان نشان دادیم که این موضوع فقط در مورد نمونه های با آلاینش پایین صحیح می باشد. همچنین تغییرات محسوسی در زمان واهلش نمونه بدون آلاینش با تغییر شدت نور لیزر دیده می شود.

The effect of Al composition and Si doping on the optical properties of GaN/AlGa_N multi Quantum Well nanostructures

M. Esmaili¹; H. Haratizadeh^{1,2}; B. Monemar²

¹Physics Department, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

²Department of Physics and Measurements Technology, Linköping University, Linköping, Sweden

Email:hamha@walla.com

Abstract

We studied the dependence of macroscopic polarization and decay time of Wurtzite III-V nitride ternary alloys multi quantum wells emission on Al composition and doping using cw-photoluminescence (PL) and Time resolved photoluminescence (TRPL) techniques. In this study all materials were grown by MOCVD, as opposed to most previous studies where MBE was employed. The recombination process in undoped samples is excitonic, while in MQWs doped with Si above about $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ PL process is a free electrons-localized holes transition at low temperatures and Al content in barrier almost don't have any influence on recombination dynamics in QWs. Hole localization in GaN/AlGa_N MQWs with different composition of Al is demonstrated via PL transient decay times and LO phonon coupling. It is found that there is a moderate increase in PL peak decay time of the QWs emission with increasing Al composition. Our datas show that increasing Al in barrier create slight blueshift in PL peak position of MQWs. Near surface band bending, due mainly to dopant depletion in doped structures or interaction with surface states in case of higher Al content in barriers, influences the distribution of electron filling among the QWs, making a detailed modeling of the spectral shape somewhat ambiguous.

Keywords: Piezoelectric polarization, Optical Study, modulation doping, Photoluminescence (PL), Quantum confined Stark Effect (QCSE), GaN/AlGa_N quantum well,

1. Introduction

GaN/AlGa_N heterostructures and quantum wells are at the heart of high-performance blue, green, and amber LEDs as well as violet laser diodes^{1,2,3}, which are now commercially available. Despite the very large number defects still present in such structures⁴, the efficiency and the lifetime⁵ of these devices are extremely good. However, the light-emitting mechanism is not yet fully understood because this material system exhibits some peculiarities. The rather poor structural material quality in term of the defect density, compositional homogeneity, abrupt interfaces, etc. compared to other heterostructures is mainly a consequence of a strong chemical difference between GaN and other element of III-N group. Nevertheless, the optical properties of nitride quantum wells (QWs) have recently been subject to quite some controversial discussion. Initially, it was proposed that carrier localization due to compositional fluctuation⁶ in GaN QWs could explain their unusual optical properties. More recently, it recognized that all group-III nitrides in the wurtzite phase have a strong spontaneous macroscopic polarization and large

piezoelectric coefficients. This has been found from ab initio calculations^{7,8}. The abrupt variation of the polarization at surfaces gives rise to large polarization sheet charges that in turn create internal electric fields of the order of MV/cm. A huge redshift of the transition energy and a strong increase of the carrier lifetime due to the quantum confined Stark effect are marked features in the optical Spectra of GaN/AlGaIn quantum wells, extensively debated in many publications.^{9,10} Significant theoretical and experimental attention has been devoted to doping of GaN: which dopants to use, how to increase doping efficiency, what sources of compensation may occur, etc. For practical electronic and optoelectronic devices, however, it is essential to be able to control not just doping of GaN, but also of AlGaIn alloys. For instance, AlGaIn alloys form the thick cladding layers in nitride-based injection lasers, and the resistivity of these layers plays a major role in the device characteristics. Most research to date has indicated that AlGaIn alloys are more difficult to dope than pure GaN, and the ability to dope AlGaIn alloys significantly decreases with increasing Al content. The decrease in doping efficiency with increasing Al content is even more dramatic for p-type AlGaIn. While p-type doping of pure GaN was originally a problem, those difficulties have largely been overcome due to the use of the Mg acceptor and the understanding of the role of hydrogen^{11,12}.

By doping of the barrier layer close to a hetero-interface, i.e. modulation doping, charge transfer across the interface occurs and the electrons form a two-dimensional electron gas (2DEG) in the approximately triangular shaped potential in the active layer close to the interface. Since these electrons are spatially separated from the donor impurities in the barriers, they should have a relatively high mobility. This is an important property utilized in devices such as high electron mobility transistors (HEMTs). Optical and electrical properties in these kinds of structures have been extensively influenced by doping; and modulation doping strongly affects the polarization-induced properties. The understanding of the electronic structure and transitions involving the 2DEG is still limited, however. To the best of our knowledge, no detailed optical investigations have been done on modulation doped GaN/AlGaIn quantum wells (QWs)¹³. Therefore, further investigations of these structures are necessary to achieve a proper understanding of the physical properties of this system, in order to exploit the full benefits of the high potential this materials system offers.

2. Samples and experimental setup

We have performed cw- photoluminescence and time resolved PL(TRPL) experiment on a set of modulation doped GaN/AlGaIn QW samples, which have different doping and Al composition in their barrier. Some similar structures have been investigated, with nearly identical optical spectra. Detailed results for these structures are discussed below. As mentioned the main differences between these samples are Al percent and doping density in barriers. The samples were grown by metal organic chemical vapor deposition on (0001) sapphire substrates. First, a 20 nm thick AlN buffer layer was grown, followed by a thick nominally undoped GaN buffer layer about 2 μ m. On top of this buffer layer, multiple quantum well structure with five periods of 3 nm wide GaN quantum well layers separated by 7 nm wide AlGaIn barriers grown¹⁴. The samples were placed in a variable temperature liquid helium bath cryostat for optical measurement at 2K. For TRPL measurements we used the third harmonics from a Ti: sapphire fs ($\lambda_{exc} = 266$ nm) pulse laser. The PL transients were detected with a UV sensitive Hamamatsu streak camera system with a temporal resolution better than 10 ps. For optical excitation in the PL measurements we have used a cw 266 nm fourth harmonic of a Nd:Vanadate laser. The PL signal was dispersed by a single-grating monochromator and detected by a UV enhanced liquid nitrogen cooled CCD camera.

3. The material quality, a limitation for studies of the physical properties

Most physical properties cannot be determined with a satisfactory accuracy unless a well defined material with a sufficiently low defect density is available. For the case of GaN the present status of the material is inadequate for an accurate determination of many physical parameters. The most suitable bulk material for physical measurements is thick epilayers grown by hydride vapor phase epitaxy (HVPE), or thin homoepitaxial layers grown by metal organic vapor phase epitaxy (MBE). The homoepitaxial material is at the moment not readily available due to the lack of GaN substrates. For the details of the electronic structure the optical data are generally required, these are not very accurate if the spectroscopic line width is too large, however. A desired line width is about 0.1 meV, however, this is not generally obtained in GaN layers available today, and a value about 1 meV is more typical in the best cases. This is due to a large dislocation density, 10^7 - 10^8 cm⁻² even in good thick HVPE grown GaN layers, and a high concentration of residual dopants or complex defects (often in the range 10^{17} cm⁻³). Such defects cause inhomogeneous strain fields that broaden spectroscopic lines for electronic transition. Measurements of electrical parameters are also of limited accuracy when the defect density is too high. The quantum structures involving GaN or AlGaIn materials are strongly influenced by polarization fields, as discussed in more detail below. Interface roughness causes a strong spectroscopic broadening, as well as In segregation effects in the case of structures containing InGaIn. The spectral broadening in optical data is due to localization of excitons or carriers in the related potential fluctuation, which are enhanced in case of strong polarization induced electric fields. These effects, which are strong for III-nitride structures, limit the spectroscopic accuracy for these quantum structures¹⁵.

4. Results and discussion

The internal electric field in our QWs is largely screened (but not completely) by the electron filling (the 2DEG) in the QWs as seen in the PL decay curves data in Fig. 1. This figure shows the PL decay time for peak position of the PL spectra for different samples. Except of undoped sample, decay times of other MQWs have an exponential behavior. There is a moderate increase of the decay time with x from 320 ps for x = 0.04 to 500 ps for x = 0.11, tracking the residual internal field. At first view we can see that PL decay times is rather long in these highly doped QWs and this is largely due to the fact that the photoexcited holes remain localized in the PL process, as discussed below. For a free carrier PL process the radiative lifetime is expected to be very short at high electron concentrations, which is not observed.

As we reported, holes are localized in GaN/AlGaIn MQWs.¹⁶ Such a hole localization can be verified experimentally by observation of LO phonon replica in PL spectra of these samples. The LO phonon coupling strength is unexpectedly strong for GaN QW system¹⁷ and LO phonon coupling strength for QW excitons is typically determined by the localization, i.e. the localization of excitons or holes strongly enhances the coupling strength^{18,19}.

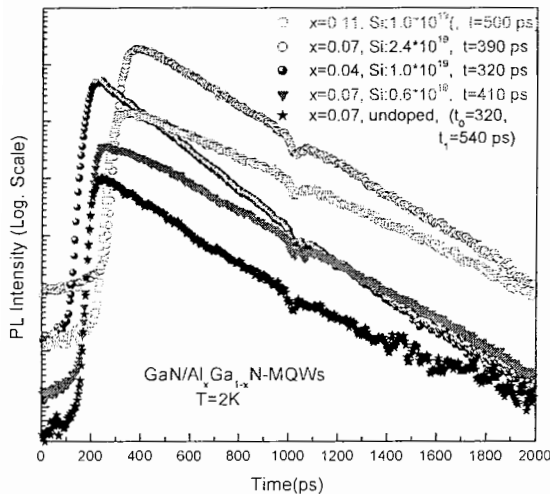


Figure1: Photoluminescence decay time curves for three MQWs with different Al composition in the barriers region.

An example has been shown in Fig. 2. In this figure we show a comparison between 3 samples with similar Al composition (0.07%) and very large difference in doping. A strong internal field also tends to increase the localization, and consequently the LO phonon coupling strength. The coupling strength to LO phonons for the main emission is comparable in the three cases, due to the hole localization that is only weakly influenced by the electrons in GaN. A combination decay and exciton relaxation is one explanation for the non-exponential decay behavior in undoped sample. The slower part of the decay time is attributed to the time for the radiative recombination and the faster part to the time for the excitons at the higher energy edge to relax to the unoccupied state at lower energy before the radiative recombination. We must mention that the coupling strength for the undoped sample is somewhat larger than other ones, because localization energy for carriers at this sample is larger (as we report at earlier work²⁰). Therefore we conclude that in MQWs doped with Si above about $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ free electrons (2DEG) are dominant, and the PL process is a free electrons-localized holes transition at low temperatures and for undoped sample there is evidence for excitonic character of the PL emission. With rising temperatures the photoexcited holes become free. Then the radiative efficiency goes down, and the PL decay time as well.

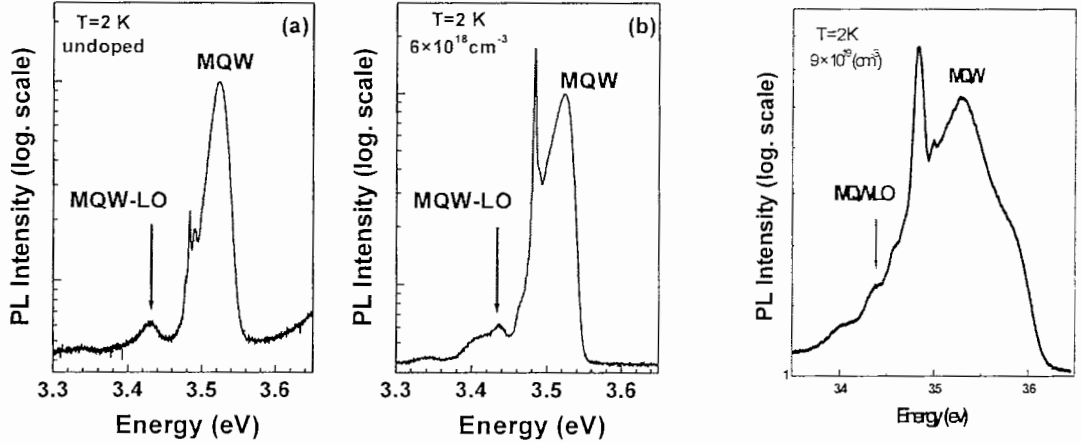


Figure 2: PL spectra of three MQW sample with different Si doping showing a comparable LO phonon coupling. The coupling strength is slightly higher for the undoped sample.

To estimate the exciton or carrier localization energy we studied the temperature dependence of the emission. The QW PL peak energies have an "S-shaped" dependence on the temperature (see figure 3). The first red shift is due to the emptying of the shallower potential valleys to the benefit of deeper one. Then the thermal energy becomes sufficient to delocalize QW excitons or carrier out of their traps and average PL energy increases again. To calculate localization energy we used Varshni formula $E(T) = E(0) - \alpha T^2 / (\beta + T)$, (where $E(0)$ is the transition energy at 0K, and α, β are constants) to fit QW peak position energy. The difference between the experimentally determined PL energies (QW peak position) and the corresponding energy evaluated from the fit at low temperature, gives an estimation of the carrier localization energy. The localization energies evaluated from this procedure are found to vary with Al composition. With increasing Al composition from $x=0.04$ to $x=0.11$ the localization energy increase from 4 to 8 meV probably due to a larger contribution of structural defects and disorder induced by higher Al, in barriers.

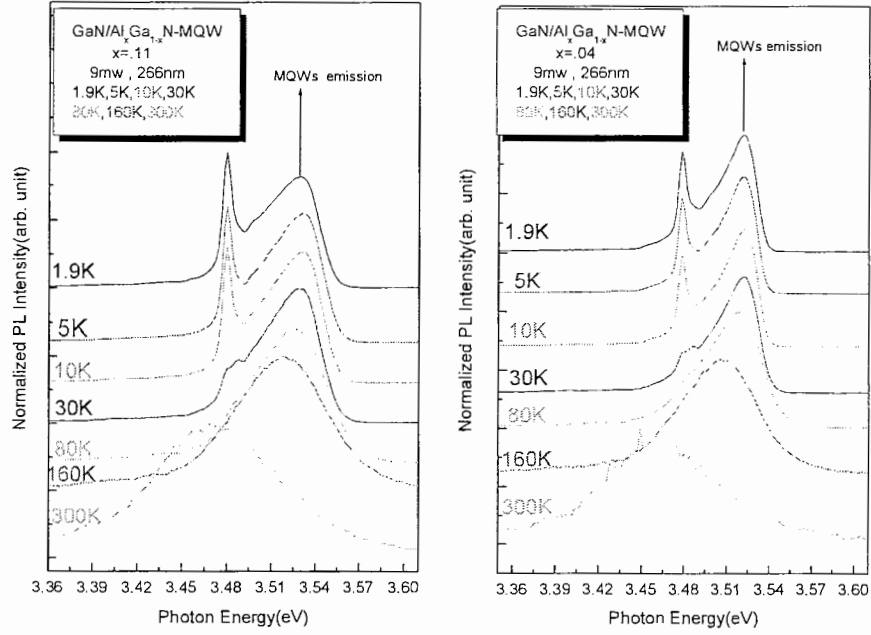


Figure 3: Temperature dependence of the MQW PL energies of the samples with Al content 0.04% and 0.11% and Si doping of $1.0 \cdot 10^{19} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$.

The normalized PL spectra of three samples with different Al content and same Si doping are shown in Fig. 4a. In this figure is illustrated how the PL spectra vary with composition. A slight upshift in QWs PL peak with increasing Al composition is observed, due the stronger confinement of the electron and hole states, which counteracted by the expected rise of the internal QW electric field with increasing x . As figure 4a shows PL linewidth increase with the Al content. The increased Al content enhances the electric field in the structure, hence efficiency in screening of the internal polarization fields increases and therefore PL peak emission moves to higher energy, for the same value of doping. In the presence of free carriers in the well, E_w (polarization field) may be expressed as²¹,

$$E_w^{tot} = (eN_s + P_b - P_w)L_b / (L_w + L_b)\epsilon_0\epsilon_r \quad (1)$$

and E_b can be calculated from

$$E_b^{tot} = (eN_s + P_w - P_b)L_w / (L_w + L_b)\epsilon_0\epsilon_r, \quad (2)$$

Where N_s is the sheet electron concentration in the well and P_b , P_w are total polarization charge accumulated at the interface of GaN/AlGa_{1-x}N heterostructures. The total polarization charge can be written as $P^{tot} = P_{pz} + P_{sp}$ where P_{pz} is the piezoelectric charge caused by the lattice mismatch and by thermal strain and this polarization can be estimated from the expression^{22,23}

$$P_{pz} = 2(a - a_0) / a_0 \{e_{31} - e_{33}C_{13} / C_{33}\} \quad (3)$$

Whereas P_{sp} represents the spontaneous polarizability of the GaN/AlGa_{1-x}N interface, as clearly demonstrated by the work of Bernardini *et al.*^{24,25}[7]. Using this relation, we can find polarization field in our samples. Our calculation shows that electric field varies linearly with the Al mole fraction in the AlGa_{1-x}N barriers (see figure 4b). Note that theoretical calculations predict that the polarization may depend on the barrier thickness too. We must mention that an extrapolation leads to a zero electric field in GaN, allowing one to be confident with data.

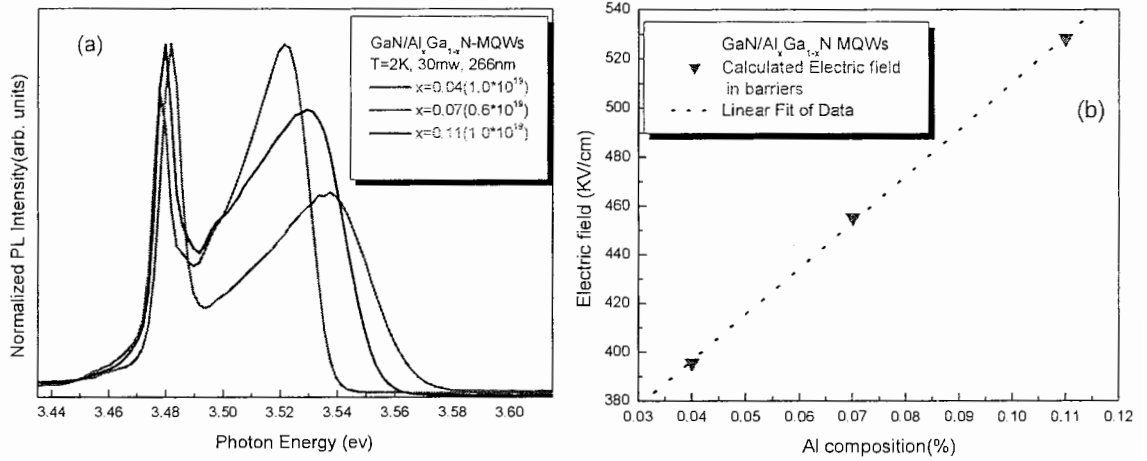


Figure 4: (a) PL spectra of a set GaN/AlGaIn MQW nanostructure with different Al mole fraction. (b) build- in electric field versus the Al content.(b) Variation of the built-in electric field as a function of the Al mole fraction in the AlGaIn barriers.

At the end of discussion we show how the PL lineshape vary with doping. The samples do not show any emission from the barriers, since there are too thin to hold the photoexcited carrier within the recombination time. For the highest doping level there is a profound broadening also of the high-energy edge of the spectrum, similar to previous studies of degenerately doped bulk GaAs²⁶ and AlGaAs/GaAs QWs²⁷. Finally, as could be seen from fig. 2 PL lineshape of doped GaN MQWs is asymmetric, with a longer low energy tail. A detailed analysis of this lineshape is uncertain due to overlap of probably inequivalent PL spectra from the different active QWs in the doped samples. The low energy onset of the emission moves to lower energy with doping, indicating the down-shifted position of the renormalized QW band gap, adjusted for a typical hole localization energy²⁸.

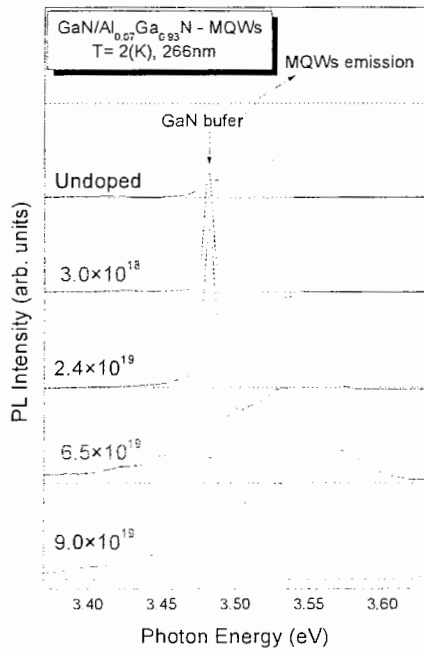


Figure 5: PL spectra of a set n-type modulation doped GaN/Al_{0.07}Ga_{0.93}N MQWs with different Si doping measured at 2 K.

5. Summary and conclusions:

We have shown experimental data for doped and undoped AlGaIn/GaN MQW structures grown by MOCVD on c-plane sapphire substrate, relevant for UV LED structures. All MQW structures were directly facing the outer surface and all samples don't have cap layer. Localization of excitons and/or holes is found to be important in these structures at low temperatures, even in the case of very high doping densities. In highly Si-doped structures the excitonic recombination is replaced by a *free electron-localized hole* transition, as is evidenced by experiments on the LO phonon coupling and the PL decay times. We found that the coupling strength to LO phonons for the main emission is comparable in our samples with different doping and same Al composition, due to the hole localization. The QW transition energies deduced from low temperature photoluminescence reveal the presence of a strong internal electric field which can reach 0.528 MV/cm for only 11% of Al content. This electric field is found to vary linearly with the Al mole fraction. We saw that there is a slight blue shift with increasing Al composition in PL peak position spectra, due to the stronger confinement of the electron and hole states. Finally we conclude from our data's that PL decay time strongly was influenced by Al composition in barriers.

Acknowledgments

The authors thank Prof. Dr. H. Amano and his co-workers at Meijo University of Japan for providing samples and we would like to thank Prof. P. O. Holtz, P. P. Paskov and J. P. Bergman for their clarifying discussion on PL and TRPL measurement results at Linköping university of Sweden.

References

- ¹ S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, S. -I. Nagahama, *Appl. Phys. Lett.* **67** (1995) 1868.
- ² S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, S. -I. Nagahama, T. Yamada, T. Mukai, *Jpn. J. Appl. Phys.* **34** (1995) L1332.
- ³ S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, S. -I. Nagahama, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto, *Jpn. J. Appl. Phys.* **35** (1996) L74.
- ⁴ S. D. Lester, F. A. Ponce, M. G. Craford, D. A. Steigerwald, *Appl. Phys. Lett.* **66** (1995) 1249.
- ⁵ S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, Y. Sugimoto, H. Kiyoku, *Jpn. J. Appl. Phys.* **36** (1997) L1059.
- ⁶ S. Chichibu, T. Azuhata, T. Sota, S. Nakamura, *Appl. Phys. Lett.* **69** (1996) 4188.
- ⁷ F. Bernardini, V. Fiorentini, and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **56**, R10024 (1997).
- ⁸ K. Shimada, T. Sota, and K. Suzuki, *J. Appl. Phys.* **84**, 4951 (1998).
- ⁹ H. Haratizadeh, B. Monemar, P. P. Paskov, P. O. Holtz, E. Valcheva, P. Persson, M. Iwaya, S. Kamiyama, H. Amano, and I. Akasaki, *phys. stat. sol. (b)* **241**, 1124 (2004).
- ¹⁰ B. Monemar, J. P. Bergman, J. Dalfors, G. Pozina, B. E. Sernelius, P. O. Holtz, H. Amano, I. Akasaki, *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.* **4**, 16 (1999).
- ¹¹ J. Neugebauer and C. G. Van de Walle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4452 (1995).
- ¹² J. Neugebauer and C. G. Van de Walle, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 1829 (1996).
- ¹³ J. P. Bergman, T. Lundström, B. Monemar, H. Amano, I. Akasaki, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 3456 (1996).
- ¹⁴ H. Amano, N. Sawaki, I. Akasaki, and Y. Toyoda, *Appl. Phys. Lett.* **48**, 35 (1986).
- ¹⁵ B. Monemar, P. P. Paskov, T. Paskova, J. P. Bergman, G. Pozina, W. M. Chen, P. N. Hai, I. A. Buyanova, H. Amano, I. Akasaki, *Material Science and Engineering B* **93** (2002), 112-122.
- ¹⁶ H. Haratizadeh, P. P. Paskov, G. Pozina, P. O. Holtz, B. Monemar, S. Kamiyama, M. Iwaya, H. Amano, and I. Akasaki, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 1373 (2002).

-
- ¹⁷ K. J. Nash and D. J. Mowbray, *J. Lumin.* **44**, 315 (1989).
- ¹⁸ X. B. Zhang and B. Gil, in: Low Dimensional Nitride Semiconductors, edited by B. Gil (*Oxford Science Publications, Oxford, 2002*), p. 257.
- ¹⁹ P. P. Paskov, P. O. Holtz, B. Monemar, S. Kamiyama, M. Iwaya, H. Amano, and I. Akasaki, in: Proc. Int. Workshop Nitride Semicond. (IWN2002), Aachen, Germany, July 20-25, 2002, *phys. stat. sol. (b)* **234**, 755 (2002).
- ²⁰ M. Esmaili, H. Haratizadeh, B. Monemar, S. Kamiyama, Proc. of the 11th Annual IASBS (Institute for Advanced Studies in Basic Sciences) *meeting on condensed matter physics*, Zanjan, Iran, May 26-27 (2005).
- ²¹ R. Cingolani, A. Botcharev, H. Tang, H. Markoc, G. Traetta, G. Coli, M. Lomascolo, A. Di Carlo, F. Della Sala, and P. Lugli, *Phys. Rev. B* **61**, 2711 (2000).
- ²² O. Ambacher, J. Majewski, C. Miskys, A. Link, M. Hermann, M. Eickhoff, M. Stutzmann, F. Bernardini, V. Fiorentini, V. Tilak, B. Schaff, and L. F. Eastman, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 3399 (2002).
- ²³ B. Monemar and G. Pozina, *Prog. Quantum Electron.* **24**, 239 (2000).
- ²⁴ F. Bernardini, V. Fiorentini, and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3958 (1997).
- ²⁵ F. Bernardini and V. Fiorentini, *Phys. Rev. B* **57**, R9427 (1998).
- ²⁶ J. De-Sheng, Y. Makita, K. Ploog, and H. J. Queisser, *J. Appl. Phys.* **53**, 999 (1982).
- ²⁷ C. I. Harris, B. Monemar, H. Kalt, and K. Köhler, *Phys. Rev. B* **48**, 4687 (1993).
- ²⁸ B. Arnaudov, T. Paskova, E. M. Goldys, S. Evtimova, and B. Monemar, *Phys. Rev. B* **64**, 045213 (2001).

Abstract

The III-nitride material family is particularly well suited for optoelectronic applications, e.g. as UV light emitters in future lighting solutions that are expected to replace the incandescent and fluorescent lamps in use today and also laser diodes(LDs), high temperature and high power electronic devices. In order to optimize the device design, it is necessary to provide knowledge on the material properties and especially to understand the recombination mechanisms in nitride QWs. A peculiarity of the nitrides is the significant macroscopic polarization with both a spontaneous and a piezoelectric component. These polarization charges create internal fields in the QWs that have fundamental influence on the optical properties, strongly affecting the oscillator strengths of excitons as well as the spectral position of the corresponding photoluminescence (PL) peaks. The radiative recombination processes are strongly modified by these built-in electric fields in the [0001] direction, which causes a substantial quantum confined stark effect (QCSE). Screening by doping and/or carrier injection strongly affects the polarization-induced properties. For instance in this thesis modulation doping technique is used to screen the macroscopic polarization fields in nitride quantum wells. The screening of the fields increases the overlap between confined electron and hole states, enhancing the radiative transition probability across the gap.

This thesis is based on the optical studies of GaN-based quantum structures consist of five period GaN/Al_{0.07}Ga_{0.93}N MQWs that have been grown on sapphire substrate along c-axis [0001] by Metal-Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD) and the thickness of well and barrier are 3nm and 7nm, respectively. The thesis is mainly based on experimental investigation by using a combination of the PL and time resolved PL(TRPL) techniques.

The results of measurements reveal the all samples with different doping levels show a QW emission which is blue shifted with respect to the 3.48 eV PL peak from the GaN buffer layer. For the undoped and low-doped samples ($3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), which have less free electrons in the QWs, a non-exponential PL decay behavior at 2 K is attributed to localized exciton recombination. The more highly doped samples show almost exponential decay curves at 2 K, suggesting the recombination of free electrons and localized holes. We found that with increasing Si doping the localization energy will decrease. The temperature dependence of radiative as well as nonradiative lifetime has also been evaluated between 2 K and room temperature for different Si doping. It has been determined that the radiative recombination (RR) mechanism dominates at the low temperature range and with increasing temperature the nonradiative recombination (NRR) will dominate. The results demonstrate that the radiative recombination channel is stronger in the Si doped samples (60 K), compared to the undoped one(30K). Overcoming of radiative recombination in spite of high defect density in high doped sample related to the dense 2DEG originating from the modulation doping in the barrier. In addition the competition between the photo-generated carriers and the Si doping on the screening of the internal polarization fields investigated.



دانشگاه صنعتی شاهرود

Shahrood University of Technology
Physics Department

Master of science Thesis
In Solid State Physics

Role of Polarization Fields on the
Photoluminescence of III-nitride QW
structures

Supervisor:
Dr. Hamid Haratizadeh

By:
Morteza Esmaili

December 2005