# فصل ۱ ساختار نواری و فرایند های بازترکیب

جامدات به سه گروه رسانا<sup>۱</sup>، نیمرسانا<sup>۲</sup>، و نارسانا<sup>۳</sup> تقسیم می شوند. یک اختلاف اساسی بین یک رسانای خوب و یک عایق خوب در میزان رسانندگی آنها است . مقاومت ویژه الکتریکی یک فلز خالص در دمای ۲<sup>۵</sup> ۱، می تواند به کوچکی Ω·۰<sup>۲۰</sup> ۱۰۰ باشد . مقاومت ویژه یک عایق خوب می تواند به بزرگی ۲۰*۳۳* ۲۰۰ باشد . این گستره اختلاف ممکن است وسیع ترین گستره در اختلاف بین ویژگی های فیزیکی متداول جامدات باشد[۱]. برای بررسی بهتر منشاء این تفاوت مناسب است اشاره مختصری به ساختار نواری جامدات داشته باشیم .

### ۱-۱ ساختار نواری جامدات

رفتار الكترونها در جامدات را مي توان از طريق معادله شرودينكر توصيف كرد [۲].

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + U(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$
<sup>(1-1)</sup>

که  $U(ec{r})$  پتانسیل موثر تک الکترونی است . این پتانسیل به دلیل دورهای بودن بلور، از رابطه زیر پیروی میکند[ au]:

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R}) \tag{(Y-1)}$$

که در آن R بردار شبکه براوه<sup>†</sup> است. در نتیجه انتظار داریم که احتمال حضور الکترون در همه سلول های واحد بلور یکسان باشد، زیرا همه سلولها کاملا همسانند . در صورتی که اگر پتانسیل متناوب نبود چنین انتظاری وجود نداشت [۲].

الکترون های مستقل که هر کدام از یک معادله شرودینگر تک الکترونی با پتانسیل دوره ای تبعیت می کنند مشهور به الکترون های بلوخ اند[۳]. تئوری بلوخ حالت های ویژه یک الکترون در یک ساختار متناوب را برای ما بیان می کند. بنابراین تئوری، حالت های ویژه هامیلتونی یک الکترون که تحت تاثیر پتانسیل متناوب ( $U(\vec{r})$ ،رابطه (۱–۲) ، قرار دارد را می توان به گونه ای برگزید که به شاکل حاصلضرب یک موج تخت در تابعی با دوره تناوب شبکه براوه باشد :

<sup>1</sup> Conductor

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Semiconductor

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Insulator

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Bravian lattice

$$\Psi_k(\vec{r}) = e^{ik.\vec{r}} u_k(\vec{r}) \tag{(7-1)}$$

که برای همه بردارهای شبکه براوه رابطه زیر برقرار است:

$$u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r} + \vec{R}) \tag{(f-1)}$$

روابط(۱-۳) و (۱-۴) ایجاب می کنند که:

$$\Psi_{k}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}.(\vec{r} + \vec{R})} u_{k}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}.\vec{r}} u_{k}(\vec{r}) e^{i\vec{k}.\vec{R}}$$
(Δ-1)  
=  $e^{i\vec{k}.\vec{R}} \Psi_{k}(\vec{r})$ 

با وجود اینکه قضیه بلوخ بیان ساده ای دارد ولی این مساله که چگونه به بهترین وجه، پتانسیل موثر مناسب را انتخاب کنیم کار دشواری <sup>۸</sup> است . روش هایی مانند روش بستگی قوی<sup>۵</sup> ، روش موج تخت افزایش یافته<sup>۶</sup> ، روش شبه پتانسیل<sup>۷</sup> ، مدل K.P ، روش موج تخت متعامد<sup>۸</sup> و ... از جمله روشهایی هستند که برای محاسبه ترازهای الکترونی به کار میروند [۲] . قضیه بلوخ یک بردار موج  $\vec{k}$  را معرفی می کند که و ... از جمله روشهایی هستند که برای محاسبه ترازهای الکترونی به کار میروند [۲] . قضیه بلوخ یک بردار موج  $\vec{k}$  را معرفی می کند که نقش اساسی در مسئله کلی حرکت الکترون در یک پتانسیل دوره ای بازی می کند. همیشه می توان بردارِ موج  $\vec{k}$  قضیه بلوخ را به منطقه اول بریلوئن یا به هر یاخته بسیط مناسب دیگر شبکه وارون محصور کرد. مرکز منطقه اول بریلوئن در (۰۰۰۰)  $\vec{k}$  قرارداد که نقطه  $\Gamma$  نقش اساسی در مسئله کلی حرکت الکترون در یک پتانسیل دوره ای بازی می کند. همیشه می توان بردارِ موج  $\vec{k}$  قضیه بلوخ را به منطقه اول بریلوئن یا به هر یاخته بسیط مناسب دیگر شبکه وارون محصور کرد. مرکز منطقه اول بریلوئن در (۰۰۰۰) ف  $\vec{k}$  قرارداد که نقطه  $\Gamma$  نامیده می شود . در شــکل (۱–۱)الف منطقـه اول بریلوئن شـــاختار بعضـی از نیمرســانـاها را تشــکیل می در د. می شده در شــدان داده شده این در در می در این شکل نشان داده شده اند. می دهد، نشـان داده شده است . برخی نقاط دیگر در منطقه اول بریلوئن که دارای تقارن بالائی هستند در این شکل نشان داده شده اند. علی می دهد، نشـین نقاط از آن جهت است که لبه ساختار های نواری مجاز در حالت کلی در این نقاط قرار می گیرد .

° Tight Binding Method

- <sup>1</sup> Augmented Plane Wave (APW) Method
- <sup>v</sup> Pseudopotential Method
- <sup>^</sup>Ortogonalized Plane wave (OPW) Method



شکل(۱-۱): الف- منطقه اول بریلوئن شبکه fcc ب- نمودار نمادینی از نحوه تشکیل نوارهای مجاز و ممنوع هنگام تشکیل بلور [۲].

از حل معادله شرودینگر با استفاده از پتانسیل های ذکر شده به توصیفی از تراز های الکترونی در یک پتانسیل دورهای می رسیم که بر حسب دستهای از توابع پیوسته  $\tilde{k}$  ( بیان می شوند و هر کدام دوره تناوب شبکه وارون را دارند . اطلاعات موجود در این توابع *ساختار نواری جامدات* را مشخص می کند. به ازای هر **n**، به مجموعه ترازهای الکترونی مشخص شده با  $\tilde{k}$  **E**<sub>n</sub>( یک نوار انرژی گفته می شود [۳]. *نواری جامدات* را مشخص می کند. به ازای هر **n**، به مجموعه ترازهای الکترونی مشخص شده با ) **آ آ** ( یک نوار انرژی گفته می شود [۳]. نحوه تشکیل ساختار نواری یک بلور به صورت نمادین در شکل (۱–۱)ب نشان داده شده است . در این شکل تراز های انرژی یک اتم منفرد نوعی را مشاهده می کنیم. با نزدیک شدن اتم ها به یکدیگر ، برای تشکیل بلور ، تراز های انرژی اتم های مجاور روی هم می افتند . به عنوان مثال اگر دو اتم به هم نزدیک شوند، به ازای هر تراز اتمی مجزا دو تراز انرژی جدا از هم تشکیل می شود. برای **n** به ازای هر اربیتال اتم مجزا، **n** اربیتال تشکیل می شود[۱]. دراثر برهم کنش بین تراز های اتمی، نوارهای مجاز و گاف نواری ممنوعه تشکیل می شود. نکته جالب توجه این است که الکترون هایی که در دورترین فاصله از هسته اتم ها واقع اند و به صورت ضعیفی به اتم های خود ا مقیدند، نوار های مجاز و ممنوعه را تشـکیل می در نتیجه همه ویژگی های اپتیکی و الکترونیکی نیمه رسـاناها از این الکترون ها ناشی می شود .



شکل(۱-۲): نمودار نمادینی از ساختار نواری فلزات، نیمرسانا ها و عایق ها.



شکل(۱-۳): نحوه آرایش وضعیت های نوار رسانش و نوار ظرفیت در نیمرساناهای دارای گاف نواری مستقیم و غیر مستقیم[۲].

نیمرساناها مواد دارای گاف نواری مستقیم <sup>۱۰</sup> گفته می شود . به نیمرساناهایی که کمینه نوار رسانش آنها در راستای  $\Gamma$  قرار ندارد  $(ec{K}
eq 0)$ مواد دارای گاف نواری غیر مستقیم <sup>۱۱</sup> گفته می شود. گاف نواری

نیمرساناهای گاف نواری مستقیم و غیر مستقیم در شکل(۱-۳) نشان داده شده است.

# ۱-۲ چگالی حالتها در سیستم های کپه ای و نانو ساختار

همانطور که اشاره شد تابع موج الکترون در نیمرسانا به صورت یک موج تخت است که بوسیله پتانسیل دوره ای بلور مدوله شده است. بنابر این اغلب می توان انرژی الکترون در نزدیکی لبه گاف نواری را با رابطه(۱-۶) تعریف کرد:

<sup>1</sup>· Direce band gap

" Indirect band gap

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \tag{(9-1)}$$

که \*m جرم موثر الکترون است . اگر حجم ماده را V=L<sup>3</sup> در نظر بگیریم، تابع موج الکترون بارابطه زیر بیان می شود:

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\pm i\vec{k}.\vec{r}} \tag{(Y-1)}$$

چگالی حالت الکترون ها در این سیستم سه بعدی با رابطه زیر بیان می شود:

$$N(E) = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} E^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3}$$
 (A-1)

اگر الکترون در یک سیستم دوبعدی محصور شود، چگالی حالت آن با رابطه:

$$N(E) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \tag{9-1}$$

و اگر در سیستم یک بعدی محدود شود با رابطه:

$$N(E) = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{1/2}}{\pi \hbar} E^{-1/2}$$
 (1.-1)

تعریف می شـود. بنابراین اگر ابعاد سـیسـتم تغییر کند، وابسـتگی انرژی چگالی حالت سـیسـتم نیز تغییر خواهد کرد. همانطور که در شـکل(۱–۴) نشان داده شده است، در یک سیستم سه بعدی وابستگی انرژی چگالی حالت به صورت E<sup>1/2</sup> است . در حالیکه در سیستم دو بعدی چگالی حالت مستقل از



شکل (۱-۴): وابستگی انرژی چگالی حالت در سیستم های الف- یک بعدی ب- دو بعدی ج- سه بعدی [۲].

انرژی سیستم است و در سیستم یک بعدی این وابستگی به صورت E<sup>-1/2</sup> در می آید. ممکن است این سوال مطرح شود که "چرا ما به سیستم های دوبعدی یا یک بعدی توجه می کنیم در حالیکه جهان ما سه بعدی است؟" با ساخته شدن نیمرسانا هایی با ساختار ناهمگون<sup>۱۲</sup> ، این امکان ایجاد می شود که الکترون در یک فضای ۲ یا ۱ بعدی محصور شود. رشد نیمرساناها با ساختار ناهمگون یکی از روش های دستیابی به ساختار نواری و گاف نواری دلخواه در نیمرساناها است. با استفاده از روش های رشد

روآراستی پرتو مولکولی (MBE) <sup>۱۲</sup> و رسوب سازی با بخار آلی- فلزی (MOCVD) <sup>۱۲</sup> امکان رشد لایه های متوالی نیمرسانا روی یکدیگر فراهم شده است. با استفاده از این تکنیک ها میتوان ماده ای با گاف نواری کوچک را با موادی با گاف نواری بزرگ احاطه کرد، و به سیستم های نانوساختار نظیر چاه کوانتومی<sup>۱۵</sup> ، سیم کوانتومی<sup>۱۹</sup> و نقطه کوانتومی<sup>۱۷</sup> دست یافت. به عنوان مثال تغییرات پتانسیل هنگام تشکیل یک ساختار ناهمگون که از آلیاژهای GaN<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub> و مقطه کوانتومی<sup>۱۳</sup> دست یافت. به عنوان مثال تغییرات پتانسیل هنگام کوانتومی بوسیله نوار رسانش و نوار ظرفیت نیمرساناهایی که روی یکدیگر رشد داده شده اند، ایجاد می شود، و در نتیجه الکترون ها و حسف ره هسا نیست رشیست ر



شکل(۱-۵) : ساختارناهمگون(چاه کوانتومی) آلیاژهای GaNAs و GaAs[۲].

" Heterostructure

#### <sup>13</sup> Molecular Beam Epitaxy

<sup>16</sup> Metalorganice Chemical Vapor Deposition

<sup>1°</sup> Quantum Well

<sup>17</sup> Quantum Wire

<sup>19</sup> Quantum Dot



شکل(۱-۶): الف- نمودار نمادینی از چاه کوانتومی و زیر نوارها. در صفحه **۲-۲** زیر نوارها با عبارتهای درجه دوم بیان می شوند. ب- وابستگی انرژی چگالی حالت در چاه کوانتومی[۲].

کریستال آزادانه حرکت کنند. آنها فقط می توانند در صفحه عمود برجهت رشد حرکت آزادانه داشته باشند. چاه کوانتومی باعث ایجاد اثر محدودیت کوانتومی<sup>۱۸</sup> می شـود. اثر حبس کوانتومی نوار رسـانش موثر را به بالا و نوار ظرفیت موثر را به پایین جابجا می کند و سـبب افزایش گاف نواری می شـود. یک سـاختار چاه کوانتومی ساده در شکل(۱-۶) نشان داده شده است . انرژی الکترون محصور در این چاه مربعی از طریق حل معادله شرودینگر به صورت زیر به دست می آید[۲]:

$$E(n,k_x,k_y) = E_z \left(=\frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{m^* W^2}\right) + E_x \left(=\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}\right) + E_y \left(=\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}\right) \qquad (11-1)$$

<sup>1</sup>A Quantum Confinement

که **W**عرض چاه مربعی است. همانگونه که از رابطه(۱–۱۱) مشخص است، انرژی این الکترون به زیر نوار های ....**n=1,2,3,...** است شده است . رفتار الکترون در هر کدام از زیر نوار ها به یک جهان دو بعدی محدود می شود و بدین ترتیب چگالی حالت های الکترون نیز به صورت پله های دو بعدی ای در می آید که در شکل نشان داده شده است. مقادیر انرژی ذکر شده فقط برای چاه کوانتومی نامحدود معتبرند. در حالیکه مقادیر انرژی برای چاه کوانتومی محدود با عبارت زیر تعریف می شوند:

$$\alpha \cot(\frac{\alpha W}{2}) = \beta \quad \underline{ \alpha} \, \tan(\frac{\alpha W}{2}) = \beta$$

$$[\beta = \sqrt{\frac{2m^*(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad , \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}} ]$$
(117-1)

مقادیر انرژیی که در هر کدام از روابط بالا صـدق کند، مقادیر مجاز انرژی هسـتند که از انرژی Ez که در رابطه(۱–۱۱) بیان شـده اسـت کوچکتر می باشند.

## ۱-۳ فرایند های باز ترکیبی در نیمرساناها

جهت بررسی فرایند های باز ترکیبی در نیمرساناها مناسب است که ابتدا اشار مختصری به انواع فرایند های باز ترکیب در نیمرساناها داشته باشیم . به فرآیند گذار یک الکترون از تراز های انرژی نوار ظرفیت به نوار رسانش و برجا گذاشتن یک حفره در نوار ظرفیت ، تولید زوج الکترون\_حفره گفته می شود . راههای تحریک نیمرسانا برای تولید زوج الکترون حفره متنوع است. به عنوان مثال تحریک ماده از طریق تابش نور ، اعمال میدان ، گرما و . . . به نیمرسانا است [۴] . در این فرایند اگر انرژی فوتون های تابش شده به نیمرسانا بزرگتر یا مساوی انرژی گاف باشد، الکترون با جذب یک فوتون از تراز پائین تر به تراز بالاتر می رود . اگر تراز بالاتری که الکترون به آن رفته است یک وضعیت غیر تعادلی باشد، الکترون با از دست دادن انرژی به سمت تراز خالی پایین تر حرکت می کند . به این فرایند باز ترکیب گفته می شود . باز ترکیب ممکن است به صورت تابشی یا غیر تابشی باشد . در فرایند باز ترکیب اگر انرژی به صورت فوتون آزاد شود باز ترکیب تابشی است و در غیر اینصورت باز ترکیب غیر تابشی است .

ویـژگـی هـای اپـتـیـکـی یـک مـاده از طـریـق مـطـالـعـه طـیـف هـای جـذبـی و نشــری آن قـابـل بـررســی می باشـد . تفاوت مهمی بین طیف های جذبی و نشری وجود دارد . فرایند جذب نوار پهنی از اختلاف انرژی بین وضعیت خالی و پر ( با بقای اندازه حرکت ) را شامل می شود و طیف پهن جذب را ایجاد می کند . ولی فرایند نشر اغلب بین وضعیت های پر نوارهای باریک غیر تعادلی و وضعیت های خالی نوارهای باریک اتفاق می افتد و یک طیف باریک تابشی را ایجاد می کند.

اختلاف بین انرژی طیف نشـری و جذبی یک نیمرسـانا جابجایی اسـتوک<sup>۱۹</sup> نامیده می شود . این اختلاف اغلب به علت نقایص موجود در ماده است، که باعث ایجاد باز ترکیب های غیر تابشی میشوند. این فرآیند به صورت نمادین در شکل (۱-۷) نشان داده شده است . منحنی های پائین و بالا ، انرژی های پائین تر و بالاتر یک گذار اپتیکی به عنوان تابعی از فاصله را نشان می دهند . این وضعیت ها می تواند مربوط به حالت های پایه و برانگیخته یک اتم ناخالصی ، یک اتم شبکه میزبان یا تراز یک تله عمیق باشند . نقطه ۱ در منحنی پا یین تر، مینیمم انرژی است و می توان آنرا وضعیت تعادل حالت پایه در نظر گرفت . یک الکترون با جذب انرژی از یک فوتون (ħ𝗤) ، می تواند به نقطه ۲ در حالت



شکل(۱-۷) : فرایند جابجایی استوک در گذارهای اپتیکی[۴].

بالاتر ( $\Delta \vec{k} = 0$ ) برود. نقطه ۲ در مینیمم انرژی وضعیت بالاتر قرار ندارد. نقطه ۳ که در فاصله  $\Delta x$  از این نقطه واقع شده است می تواند از یک نقص یا پتانسیل ناخالصی ایجاد شده باشد . با رفتن الکترون به نقطه ۳ سیستم موقتا آرام می شود. نقطه ۳ در کمترین انرژی وضعیت بالاتر قرار دارد . این پدیده که اغلب واهلش شبکه ۲۰ نامیده می شود، با حضور یک فونون همراه است . پس از سپری شدن زمان وضعیت بالاتر قرار دارد . این پدیده که اغلب واهلش شبکه ۲۰ نامیده می شود، با حضور یک فونون همراه است . پس از سپری شدن زمان واهلتش ، حامل تحریک شحده با یک باز ترکیب تابشی به نقطه ۴ (که ایت نقطه ۱ سیری شدن زمان در مینیمم انرژی حالت پائین تر قرار نگرفته است) باز می گردد و یک فوتون با انرژی  $\hbar \omega_2$  تابش می کند . پس از آن با خلق یک فوتون و بازگشت حامل به نقطه ۱ سیستم می ترد از می گردد . اختلاف انرژی  $\hbar \omega_1 - \hbar \omega_2$  می شود . اختلاف انرژی و بازگشت حامل به نقطه ۱ سیستم می می درد . این سیم می می در می شود . با حضور یک فوتون و بازگشت حامل به نقطه ۱ سیستم به حالت تعادل باز می گردد . اختلاف انرژی  $\hbar \omega_1 - \hbar \omega_2$ 

<sup>14</sup> Stokes shift

**\***•. lattice relaxation.

#### 1-۳-۱ بازترکیب مستقیم و غیر مستقیم

فرایند باز ترکیب در نیمرساناهای دارای گاف نواری مستقیم و غیر مستقیم با هم متفاوت است . در نیمرساناهایی با گاف نواری مستقیم همان طور که در شکل (۱-۸) الف مشاهده می شود،



شکل(۱–۸): فرایندهای باز ترکیب الف – مستقیم و ب– غیر مستقیم در نیمرساناها[۴]. مینیمم نوار رسانش و ماکزیمم نوار ظرفیت در نقطه  $\Gamma$  ( $\bar{k} = 0$ ) واقع می شوند.بنابراین در مواد گاف مستقیم یک الکترون برانگیخته پس از مدت زمان کوتاهی با یک حفره در نوار ظرفیت باز ترکیب می شـود و بدون نیاز به حضـور فونون انرژیی معادل انرژی گاف نواری بس می کند. بدین ترتیب بازده باز ترکیب تابشی در نیمرساناهای گاف مستقیم زیاد است . همان طور که در شکل (۱–۸)ب مشاهده می می کند. بدین ترتیب بازده باز ترکیب تابشی در نیمرساناهای گاف مستقیم زیاد است . همان طور که در شکل (۱–۸)ب مشاهده می نمائید در نیمرساناهای گاف غیر مستقیم ، رسانش در  $0 = \bar{k}$  واقع نمی شود ، بنابر این در بازترکیب الکترون– حفره نیاز است تا مینیمم یک فونون خلق یا جذب شـود، تا قانون پایسـتگی اندازه حرکت و انرژی به طور همزمان برقرار شـود . بنابراین تا زمانی که یک فونون با انرژی و اندازه حرکت مورد نیاز موجود نباشـد، الکترونی که در انتهای نوار رسانش در  $0 \neq \bar{k}$  قرار دارد نمی تواند با حفره ای که در قله انرژی و اندازه حرکت مورد نیاز موجود نباشـد، الکترونی که در انتهای نوار رسانش در  $0 \neq \bar{k}$  قرار دارد نمی تواند با حفره ای که در قله بوار رسانش در  $0 = \bar{k}$  قرار دارد باز ترکیب شود . به همین دلیل مدت زمان باز ترکیب الکترون و حفره افزایش می یابد. از آنجا که هیچ بوار رسانش در مایز می در از موجود نباشـد، الکترونی که در انتهای نوار رسانش در مایز باز ترکیب الکترون با حفره ای که در قله زیادی وجود دارد که الکترون و حفره از طریق این مراکز به صورت غیر تابشی باز ترکیب شوند و انرژی آنها به صورت گرما در بلور پراکنده شود . بنابراین در حالت عمومی نیمرساناهای دارای گاف نواری غیر مستقیم برای استفاده در قطعات نورگسیل<sup>۳۱</sup> مناسب نیستند .

#### ۱-۳-۱ انواع فرایندهای بازترکیبی در نیمرساناها

فرآیند های بازترکیبی در نیمرساناها را می توان به ۳ دسته تقسیم بندی نمود:

۱. گذارهای نوری لبه گاف نواری.

۲. گذار های مربوط به تراز های عمیق.

۳ . بازترکیب اوژه<sup>۲۲</sup>.

#### ا-۳-۲ گذارهای نوری لبه گاف نواری

*الف) باز ترکیب اکسیتونی <sup>۲۲</sup>:* طیف های جذب و بازتابش برای انرژی های فوتونی ای که درست زیر گاف نواری قرار دارند غالبا دارای ساختارند . این ساختار به دلیل جذب یک فوتون همراه با ایجاد یک اکسیتون در یک فرآیند مستقیم یا غیر مستقیم به وجود می آید. درست همان گونه که الکترون به پروتون مقید می شود، الکترون و حفره نیز می توانند با بر هم کنش الکتروستاتیکی جاذب خود به یکدیگر مقید شوند. سیستم الکترون و حفره مقید اکستیون نامیده می شوند . اکسیتون می توانند درون بلور حرکت کند و انرژی برانگیختگی را منتقل کند، ولی از نظر الکتریکی خنثی است. اکسیتون ها می توانند در هر بلور عایقی تشکیل شوند و نسبت به فرایند نیسیه سایر می توانند در هر بلور عایقی تشکیل شوند و نسبت به فرایند

<sup>&</sup>lt;sup>\*1</sup> Light Emitting Diode (LED)

<sup>&</sup>lt;sup>**rr**</sup> Auger Recombination

FF Exciton



شکل (۱-۹) : الف- اکسیتون یک زوج الکترون و حفره مقید است که معمولا همراه یکدیگر آزادانه در بلور حرکت می کنند. اکسیتون نشان داده شده اکسیتون وانیر ـ مات<sup>۲۴</sup> است .این نوع اکسیتون به طور ضعیف مقید است و فاصله متوسط الکترون و حفره در مقایسه با ثابت شبکه بزرگ است . ب- یک اکسیتون قویا مقید یا اکسیتون فرنکل<sup>۲۵</sup> نشان داده شده است، که به طور موضعی بر روی یک اتم در یک بلور هالوژنید قلیایی قرار دارد . اکسیتون فرنکل ایده آل مانند موج در سرتاسر بلور حرکت می کند ولی الکترون همواره نزدیک حفره باقی می ماند[۱].

الكترون با حفره باز تركيب مي شود ذاتا ً ناپايدارند.

هرگاه فوتونی با انرژی ای بیش از انرژی گاف در بلور جذب شود یک الکترون آزاد تشکیل می شود آستانه این فرایند ، در بازترکیب مستقیم  $R_g = \frac{\hbar\omega}{\hbar\omega}$  پائین تر است . ولی در تشکیل بازترکیب مستقیم  $R_g = \frac{\hbar\omega}{\hbar\omega}$  پائین تر است . ولی در تشکیل اکسیتون انرژی نسبت به این آستانه ها به اندازه انرژی بستگی اکسیتون که ممکن است در گسترده **meV** با تا **eV** باشد ، پائین می آید . در شکل(۱-۱۰) تراز های انرژی استانه ها به اندازه انرژی بستگی اکسیتون که ممکن است در گسترده **wev** مورد بحث قرار می دهند. یک یک یک تقریب ورزی نسبت به این آستانه ها به اندازه انرژی بستگی اکسیتون که ممکن است در گسترده **wev** مورد بحث قرار می دهند. یک ید در شکل(۱-۱۰) تراز های انرژی اکسیتونی نشان داده شده است. اکسیتونها را در دو تقریب حدی گوناگون مورد بحث قرار می دهند. یکی تقریب فرنکل که در آن اکسیتون کوچک و تقریبا مقید است و دیگری تقریب وانیر – مات که در آن اکسیتون به طور ضعیف مقید و فاصله الکترون — حفره در مقایسه با ثابت شبکه بزرگ است[۱]. انرژی بستگی اکسیتون وانیر با توجه به تئوری جرم موثر<sup>37</sup> از رابطه زیر فاصله الکترون — حفره در مقایسه با ثابت شبکه بزرگ است[۱]. انرژی بستگی اکسیتون وانیر با توجه به تئوری جرم موثر<sup>34</sup> از رابطه زیر فاصله الکترون — حفره در مقایسه با ثابت شبکه بزرگ است[۱]. انرژی بستگی اکسیتون وانیر با توجه به تئوری جرم موثر<sup>34</sup> از رابطه زیر فاصله الکترون — دفره در مقایسه با ثابت شبکه بزرگ است[۱]. انرژی بستگی اکسیتون وانیر با توجه به تئوری جرم موثر<sup>34</sup> از رابطه زیر فاصله الکترون - دفره در مقایسه با ثابت شبکه بزرگ است[۱]. انرژی بستگی اکسیتون وانیر با توجه به تئوری جرم موثر<sup>34</sup> از رابطه زیر فاصله الکترون - دفره در مقایسه با ثابت شبکه بزرگ است[۱]. انرژی بستگی اکسیتون وانیر با توجه به تئوری جرم موثر<sup>34</sup> از رابطه زیر فاصله الکترون - در مقایسه با ثابت شبکه بزرگ است قرار است در ای اکسیتون وانیر با توجه به تئوری مورد موز ای از رابطه زیر فاصله الکترون - در مقایسه با ثابت شبکه بزرگ است [۱]. انرژی بستگی اکسیتون وانیر با توجه به تئوری به توره با به با

$$E_{ex} = \frac{-13.6}{l^2} \frac{m_r^*}{m_0} (\frac{1}{\varepsilon_r})^2 \quad \text{(eV)} \qquad \qquad I = 1, 2, 3, \dots \qquad (17-1)$$

۴٤ Wanneir - Mot

- \*• Frenkel
- <sup>r</sup> Effective Mass Theory



شکل(۱۰-۱۰) : ترازهای انرژی اکسیتونی که در یک بازترکیب مستقیم ایجاد می شوند.پیکانها گذارهای اپتیکی از بالای نوار ظرفیت را نشان می دهند. طولانی ترین پیکان مربوط به گاف انرژی است.انرژی بستگی اکسیتون نسبت به الکترون – حفره آزاد Eex است .خط جذب در صفر مطلق Eg-Eex است [1].

#### جدول(۱-۱) : انرژی بستگی اکسیتون ها بر حسب mev [۱].

|      | انرژی بستگی اکسیتون (meV) |
|------|---------------------------|
| GaAs | ۴/۲                       |
| GaP  | ٣/۵                       |

: جرم موثر کاهش یافته است که از رابطه زیر به دست می آید $m_r^st$ 

$$m_r^* = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*}$$
(1)\(\mathcal{T}-1)

به عنوان نمونه انرژی بستگی اکسیتون در نیمرساناهای GaAs و GaP در جدول(۱-۱) نشان داده شده است. انرژی کل یک اکسیتون با رابطه زیر بیان می شود:

$$E_{ex} = \frac{\hbar^2 k_{ex}^2}{2(m_e^* + m_h^*)} - E_{ex}^l$$
(14-1)

که جمله اول انرژی جنبشی اکسیتون است. در گذارهای مستقیم پایستگی اندازه حرکت برقرار است( $ec{k}=0$ ). انرژی ای که از باز ترکیب الکترون و حفرهٔ یک اکسیتون آزاد می شود عبارت است از:

$$\hbar\omega = E_g - E_{ex} \tag{12-1}$$

فرآیند باز ترکیب اکسیتون در شکل(۱–۱۱) نشان داده شده است. در نیمرساناهای گاف غیر مستقیم (شکل(۱–۱۱)ب) برای حفظ بقای اندازه حرکت وانرژی گذار مربوطه باید شامل یک فونون باشد. بنابراین بازده بازترکیب اکسیتونی در نیمرساناهای گاف نواری غیر مستقیم کسیم اسیسیت. اکسیسیت ون هسیایی می اسیسیت ون می ایر داشته که تا کنون در مورد آنها بحث نمودیم اکسیتون های آزاد<sup>۲۷</sup> بودند. در نیمرساناهایی که ناخالصی های دهنده<sup>۲۸</sup> یا پذیرنده<sup>۲۹</sup> حضور داشته باشند ، اکسیتون آزاد ممکن است توسط اتم های ناخالصی به دام



شکل(۱-۱۱): فرایند باز ترکیب اکسیتون درنیمرساناهای دارای الف گاف نواری مستقیم و ب گاف نواری غیرمستقیم را نشان می دهد . در نیمرساناهای گاف غیر مستقیم ،گذار مربوطه باید شامل یک فونون باشد تا بقای اندازه حرکت حفظ شود[۴] .

<sup>rv</sup> Free exciton.

M Donor

<sup>rq</sup> Acceptor

بیفتد و یک اکسیتون مقید<sup>۳۰</sup> را ایجاد کند . اکسیتون های مقید به صورت قله های تیز قبل از اکسیتون های آزاد ظاهر می شوند [۴]. انرژی حاصل از باز ترکیب این نوع اکسیتون عبارت است از:

$$\hbar\omega = E_g - E_{ex} - E_{bound} \tag{19-1}$$

در اثر عوامل متعددی پتانسیل شبکه بلوری نیمه رسانا ممکن است دچار اغتشاش شود و افت و خیزهایی در پتانسیل شبکه بلوری ایجاد شود . این افت خیزها نیز می توانند سبب جایگزیدگی اکسیتون ها شود. انرژی آزاد شده از باز ترکیب اکسیتون های جایگزیده<sup>۳۱</sup> (LE) به اندازهٔ انرژی جایگزیدگی از انرژی اکسیتون آزاد کمتر است.

$$\hbar\omega = E_g - E_{ex} - E_{Loc} \tag{1Y-1}$$

ب) بازترکیب نوار به نوار :</u> اگر دمای نمونه تا حدی زیاد باشـد که  $E_{ex}$  ، یا اگر تعداد حامل های آزاد در نیمرسـانا در حدی باشد که با ایجاد میدان های محلی الکترون و حفره اکسیتون از هم جدا شوند [۴]، اکثر حامل هایی که در اثر تحریک فوتونی نمونه، در نوارها ایجاد می شوند، الکترون ها و حفره ها می باشند. اکثر این حامل های آزاد می توانند با هم بازترکیب می شوند .

اگر نیمرسانا دارای گاف نواری مستقیم باشد، الکترون و حفره با حفظ پایستگی اندازه حرکت باز ترکیب می شوند. موقعیت انرژی قله طیف نیمرسانا به دما و شدت تحریک بستگی دارد. در دماهای پایین و شدت های تحریک کم، بازترکیب به وسیله یک پیک یا قطع در بخش کم انرژی طیف با انرژی:

$$\hbar\omega = E_g \tag{1A-1}$$

مشخص می شود . با افزایش دما یا افزایش شدت تحریک، الکترون ها و حفره ها در نوارهای مربوطه، حالت هایی با انرژی بالاتر را پر می کنند، و در نتیجه انرژی فوتون هایی که از طریق بازترکیب آنها آزاد می کنند افزایش می یابد. این پدیده در طیف نشری به صورت دنباله ای در بخش پر انرژی طیف ظاهر می شود. به همین ترتیب اگر آلایش نمونه افزایش پیدا کند، سرتاسر منحنی طیف نشری حاصل از آن، به علت اثر دنباله نواری<sup>۲۲</sup>، به سمت انرژی های پایین تر جابجا می شود.

30. Bound exciton.

#### **\*1**. Localized Exciton.

" Bandtailing Effect

ج)ب*از ترکیب زوج دهنده \_\_ پذیرنده*<sup>۳۲</sup>: نوع دیگر بازترکیب ، بازترکیب الکترون های مقید به ترازهای دهنده یا حفره های مقید به تراز های پذیرنده (شکل(۱–۱۲)ج) می باشد. این باز ترکیب تنها بازترکیبی است که مکان هندسی اتم ها در آن نقش دارد. در بقیه باز ترکیب ها فقط موقعیت انرژی اتم ها نقش دارد . انرژی این فرایند بازترکیبی با رابطه زیر بیان می شود:

$$\hbar\omega = E_g - E_A - E_D + \frac{q^2}{\varepsilon r} + J(r)$$
(19-1)

در این عبارت E<sub>A</sub> وE<sub>D</sub> انرژی های بستگی اتم های پذیرنده و دهنده، و جمله چهارم برهمکنش کولونی بین اتم های دهنده و پذیرنده می باشد. جمله آخر، جمله تصحیحی است که به برهمکنش دوقطبی– دوقطبی بین اتم ها مربوط می شود.



شکل (۱-۱۲) : شکل نمادینی از انواع بازترکیبهای تابشی در نیمرساناها: الف) بازترکیب اکسیتون آزاد، و بازترکیب اکسیتون مقید. ب) بازترکیب نوار به نوار الکترون و حفره آزاد. ج) بازترکیب زوج الکترون و حفره مقید به ترازهای ناخالصی. د) بازترکیب الکترون مقید به تراز دهنده با حفره آزاد ، و بازترکیب الکترون با حفره مقید به تراز پذیرنده.

د) باز ترکیب ناخالصی ـ نوار<sup>۲۰</sup>: به باز ترکیب الکترون های مقید به اتم های دهنده با حفره آزاد و یا باز ترکیب الکترون های آزاد با حفره های مقید به اتم های پذیرنده ، باز ترکیب ناخالصی نوار گفته می شود. نمودار نمادینی از این فرایند بازترکیبی در شکل(۱–۱۲)د نشان داده شده است.

<sup>&</sup>quot;" Donor-Acceptor Pair Transition

<sup>&</sup>quot;<sup>£</sup> Impurity-Band Transition

مسئله ای که باید به آن توجه داشت این است که، اگر حامل های مورد نیاز برای بازترکیب های زوج دهنده - پذیرنده ، ناخالصی- نوار، و نوار به نوار فراهم باشد احتمال کدام گذار بیشتر است . محاسبات نشان می دهد که طول عمر حامل های ناخالصی به نوار در حدود چندین نانو ثانیه به دست می آید، در حالی که طول عمر گذار نوار به نوار در محدوده چند صد پیکو ثانیه تا یک نانو ثانیه تغییر می کند[۴]. بنابراین اگر الکترون هایی در نوار رسانش و ترازهای دهنده و حفره هایی در نوار ظرفیت و تراز های پذیرنده ، وجود داشته باشند ، احتمال باز ترکیب نوار به نوار به نوار تقریبا ۴ برابر گذار ناخالصی ـ نوار می باشد[۴] .

#### ا-۳-۲ گذار های مربوط به تراز های عمیق

تراز های عمیقی که داخل گاف نواری نیمرساناها وجود دارند، نقش مراکز به دام اندازی حاملها را بازی می کنند، و به این ترتیب کارایی قطعات را کاهش می دهند. نقایص نقطه ای در شبکه (شکل(۱–۱۳)) مانند: تهی جای ها<sup>۲۵</sup> ، ناخالصی های جانشین<sup>۳۶</sup> ، ناخالصی های میانین<sup>۳۷</sup> (که در نقاط بین شبکه ای می نشینند) و . . . می توانند منشاء این تراز های عمیق باشند . نظریه رایج این است که، انرژی حاصل از بازترکیب حامل های این تراز ها ، به صورت فونون آزاد می شود [۲] . به این تراز ها « مراکز کشنده » نیز گفته می شود.



شکل (۱–۱۳): نقایص نقطه ای موجود در شبکه های بلوری [۲].

**\*o**. Vacancy.

۳٦. Substituional .

**TY**. Jnterstitial.

#### ا-۳-۲-۳ باز ترکیب اوژه

در نیمرساناهای گاف مستقیم که با غلظت بالایی آلایش شده اند، یکی از مهمترین فرایندهای که با بازترکیب نوار به نوار رقابت می کند ، بازترکیب اوژه است. در این بازترکیب انرژی و اندازه حرکت آزاد شده از باز ترکیب جفت الکترون – حفره به حامل دیگری (الکترون یا حفره) داده می شود. سپس این انرژی و اندازه حرکت با گسیل یک فونون نابود می شود [۵]. نکته قابل توجه در این بازترکیب این است که در این فرآیند هیچ فوتونی تولید نمی شود و جفت الکترون و حفره بدون ایجاد فوتون نابود می شوند . بازترکیب اوژه به چند صورت اتفاق می افتد که عبارتند از CCHH و CHHL و SCHE[۴]. به عنوان نمونه، بازترکیب های CHHS و CCHH در شدکل(۱–۱۴) نشان داده شده اند. C و H و J و J و J و L و به ترتیب به نوار رسانش، حفره سنگین، حفره سبک و حفره ناشی از شکافتگی اسپین مدار اشاره دارد، که موقعیت حاملهای شرکت کننده در بازترکیب اوژه را نشان می دهد. به عنوان مثال CCCH اشی از سرانش قرار داره می شوند انرژی افزه به در آن الکترون نوار رسانش و حفره سنگین بازترکیب اوژه را نشان می دهد. به عنوان مثال CCCH اشی از سرانش قرار داره، می شوند الرژی افزه به بر آن موقعیت حاملهای شرکت کننده در بازترکیب اوژه را نشان می دهد. به عنوان مثال CCCH اشی از سرانش و داره می شود. انرژی اضافی به رورت فونون آزاد شده و الکترون در نوار رسانش باقی می ماند.



شکل(۱–۱۴): انواع بازترکیب های اوژه[۴].

# فصل ۲

# آشنایی با نیمرساناهای نیتروژن دار رقیق

◄ نیمرساناهای نیتروژن دار رقیق گروه V – III
◄ مدل های تئوری مطالعه آلیاژهای نیتروژن دار رقیق

### ۲-۱ نیمرساناهای نیتروژن دار رقیق گروه ۷ – ۱۱۱

نیمرساناها را می توان بر اساس عناصر تشکیل دهندهٔ آنها به گروههای مختلفی نظیر گروه ۱۷ و ۱۱۰ و ارس های رشد و ۱۷-۱۱ دسته بندی نمود . فیزیک حاکم بر رفتار نیمرساناهای گروههای مختلف ، کاربردها و روش های رشد آنها با هم متفاوت است. با حضور درصد اندکی نیتروژن در ترکیبات نیمرسانای گروه ۷-۱۱۱ ، آلیاژهای نیتروژن دار رقیق<sup>۲۸</sup> ۷–۸–۱۱۱ حاصل می شوند، که رفتار غیر عادی و در عین حال جالب توجهی از خود بروز می دهند. از جمله خصوصیات مهم آلیاژهای نیتروژن دار رقیق پایداری آنها در مقابل شرایط سخت محیطی، مانند دماهای بالا ، ارتعاشات شدید محیطی و شرایط شیمیایی فعال و گستره وسیع گاف نواری آنها از مادون قرمز تا ماوراء بنفش می باشد.

این ترکیبات به دلیل اهمیت علمی و کابردهای گسترده تکنولوژیکی، در سالیان اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته اند. این مواد پتانسیل بالقوه زیادی برای کاربرد در ساخت قطعات اپتوالکترونیکی دارند.به عنوان مثال استفاده از این ترکیبات در ساخت سلولهای خورشیدی چند پیوندی با بازده بالا و لیزرهای مادون قرمز نزدیک که در فیبرهای نوری مخابراتی در محدوده ۱/۵۵–۱/۳ میکرومتر کاربرد دارند[۱]، باعث گشوده شدن افق هایی نو در زمینه ساخت قطعات جدید با کیفیت های بالا گردیده است.

نیمرساناهای نیتروژن دار رقیق همان طور که اشاره شد، آلیاژهایی از ترکیبات سه تایی یا چهارتایی گروه۷-۱۱۱ هستند که آنیون آنها با نیتروژن آمیخته شده و غلظت نیتروژن آنها معمولا از پنج درصد کمتر می باشد. به عنوان مثال ترکیباتی مانند GalnNAs، GaNAP، GaNP، GaNAS و GalnNAs که از طریق آلایش نیمرساناهای رایج گروه ۷-۱۱۱ مانند GaAs و GaP با نیتروژن ، و جانشینی نیتروژن به جای عنصر گروه ۷در شبکه بلوری این ترکیبات ساخته می شوند، از نیمرساناهای معروف این گروه می باشند.

<sup>r^</sup>Dilute Nitrides Alloys

رشـد و مطالعه این ترکیبات از حدود دهه ۱۹۹۰ به دنبال موفقیت هایی که در رشـد آلیاژهای ۷-۱۱۱ (ترکیبات (Al,Ga,In)(As,P) بدست آمد آغاز گردید. محرک اصلی ساخت این ترکیبات فراهم شدن تغییرگاف نواری بین گاف نواری ترکیبات N-۱۱۱ و As-۱۱۱ بود؛ تا از این طریق امکان تولید قطعات نورگسـیلی که همه محدوده طیف مرئی را پوشـش دهند فراهم شـود. به سـرعت مشخص شدکه ترکیبات نیتروژن دار رقیق به کلاس جدیدی از نیمرساناهای موسـوم به نیمرساناهای دارای عدم توافق بزرگ<sup>۲۰</sup> تعلق دارند، که ویژگیهایی آنها با سایر آلیاژهای مرسوم تفاوت آشکاری داشت.

اتم نیتروژن به علت اندازه کوچک و الکترونگاتیویته بالایی که در مقایسه با سایر عناصر گروه ۷ دارد منشاء ایجاد خواص شگفت انگیزی در آلیاژهای نیتروژن دار رقیق گردیده است. عمده ترین تأثیر نیتروژن ایجاد خمش بزرگ در گاف نواری این ترکیبات است. در آلیاژهای هم ظرفیت رایج گروه ۷-۱۱۱، گاف نواری ترکیبات ۲۰۵۸ به نسبت میانگین وزنی ترکیب، با ضریب خمش (اغلب کوچکتر از ۱۹۷) تغییر می کند. به عنوان مثال گاف نواری آلیاژ ۲۰۰۰ در میارا با در ایل محاسبه است [۱]:

$$E_{g}(x) = xE_{AC} + (1-x)E_{BC} - bx(1-x)$$
(1-7)

 $A_x B_{1-x} C$  و  $E_{BC}$  و  $E_{BC}$  و  $E_{BC}$  و الماتر خمش  $E_g$  و الماتر خمش  $E_g$  و الماتر  $E_{BC}$  و  $E_{AC}$  و المات. در آلیاژ  $E_{BC}$  و  $E_{AC}$  المات. و در غلظت GaN<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub> و GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> (Lulter back of the second state of the seco

$$x_{N} < 1/. \rightarrow b \approx 79 \text{ eV}$$
 (T-T)  
 $x_{N} > 1/. \rightarrow b \approx 19 \text{ eV}$ 

\*• Highly Mismatched Semiconductor

\* Bowing Parameter

گاف نواری ترکیب سه تایی GaNAs با افزایش درصد N سریعاً کاهش می یابد، و با حضور فقط ۱٪

نیتروژن کاهش شدید گاف نواری در دمای اتاق از ۱/۴۲ ev به ۱/۴۲ مشاهده می شود[۱]. علاوه بر خمش شدید گاف نواری، حضور نیتروژن سبب کاهش ثابت شبکه بلوری در این آلیاژها می شود(شکل(۲-۱)). در آلیاژهای رایج گروه ۷-۱۱۱ کاهش گاف نواری در اثر افزودن یک عنصر، با افزایش ثابت شـبکه همراه است ؛ که این موضوع در مورد آلیاژهای نیتروژن دار رقیق به صورت بالعکس اتفاق می افتد. همچنین حضور نیتروژن سـبب شکافتگی غیر طبیعی وضعیت های نوار رسانش به ۲ زیر نوار، وابستگی خطی گاف نواری به فشـار هیدروسـتاتیک، کاهش تغییرات دمایی گاف نواری، افزایش جرم موثر الکترون، تغییر چشـمگیر در مشـخصـه لبه نوار رسـانش و وضـعیت های مرتبه های بالاتر نوار رسانش، و کاهش تحرک الکترونی می

به دلیل اینکه آلیاژهای نیتروژن دار رقیق، از انطباق بالایی با شــبکه بلوری زیر لایه های Si ،Ge و GaAs برخوردارند، و محدوده گاف نواری آنها متمم محدوده گاف نواری بقیه نیمرسـاناها اسـت، مواد نوید بخشی برای کاربرد درسلولهای خورشیدی چندپیوندی و قطعات فتوولتایی با بازده بالا می باشند. ولی جدی تـریـن مـانـع در مسـیـر پیشـرفـت این قطعـات، ترابرد ضـعیف حـاملهـا در نیمرسـانـاهـای



شکل(۲-۱):گاف نواری نیمرساناها را بر حسب ثابت شبکه [۳].

۷-۱۱۱ ۱۱۱ ۱ست. اخیرا ساخت سلولهای خورشیدی سه پیوندی یکپارچه برای کاربردهای فضایی بسیار مورد توجه واقع شده است . جهت ساخت قطعاتی با بازده بالاتر، لازم است از گروهی از ترکیبات را ۱۱۱ استفاده شود، که گاف نواری آنها از GaAs کوچکتر باشد، و از انطباق خوبی با شبکه بلوری GaAs می ۷- ۱۱۱ استفاده شود، که گاف نواری آنها از GaAs کوچکتر باشد، و از انطباق خوبی با شبکه بلوری GaAs می برخوردار باشند تا نقایص ناشی از کرنش (که تا چندین مرتبه کارایی سلولهای خورشیدی را کاهش می برخوردار باشند تا نقایص ناشی از کرنش (که تا چندین مرتبه کارایی سلولهای خورشیدی را کاهش می دهد) کاهش پیدا کند.کشف خواص منحصر بفرد GaNas ، خانواده جدیدی از مواد را برای این دسته از کاربردها معرفی کرد. مشکلی که در مسیر پیشرفت این قطعات وجود دارد عمق نفوذ کوچک حاملها در این مواد است. این مسئله مشکلی جدی برای کاربرد این مواد در سلولهای خورشیدی با بازده بالا می باشد. زیرا در این سلولها، به عمق نفوذ بلندی برای جمع آوری حاملهای تولید شده بوسیله نور نیاز می باشد. زیرا در این سلولها، به عمق نفوذ بلندی برای جمع آوری حاملهای تولید شده بوسیله نور نیاز می باشد. زیرا

با توجه به خواص ویژه این ترکیبات، امید است که تحولات تازه ای در تکنولوژی ساخت قطعات THz (مربوط به حواس پنجگانه و علم پزشکی) ، مدارهای مجتمع الکترونیکی (OEICs) جهت کاربرد در پردازش های سری و امور دفاعی، و توسعه رشد ترکیبات ۷-۱۱۱ روی سیلیکون به منظور ایجاد اتحاد بیشتر بین الکترونیک و اپتوالکترونیک، ایجاد شود[۱].

#### ۲–۲ مدل های تئوری مطالعه نیمرساناهای نیتروژن دار رقیق

تا کنون مدل های تئوری متنوعی برای بررسی خواص غیر عادی نیمرساناهای نیتروژن دار رقیق گروه ۷-۱۱۱ ارائه شده است [۷–۴،۱] . برخی از این تئوری ها، پیش بینی های قابل قبولی در مورد خصوصیات ترکیبات گروه ۷-۱۱۱ داشتند؛ در حالی که در مورد پیش بینی رفتار ترکیبات ۷-۱۰۰۱ ناتوان هستند[۸]. نتایج آزمایشهای فشار [۹]، فوتولومینسانس (PL) و شواهد تئوری [۵]، به این نکته اشاره دارد که برای ارائه مدل های دقیق باید نوسانات محلی در توزیع ۸ (شامل شکل گیری اتفاقی جفت ها وخوشه های نیتروژنی)صریحاً مورد توجه قرار گیرد. عمده ترین روش های ارائه شده برای بررسی این ترکیبات روش های : ۱- تشکیل نوار ناخالصی ۲۰ ۲- مدل آلیاژ هم ریخت ۳ و ۳- مدل آلیاژ چند ریخت ۳ می باشند.

مدل اول بر این اساس بنا شده است که وضعیت های ناخالصی، زیر نوار رسانش آلیاژ میزبان نوار جدیدی تشکیل می دهند ، و باعث پایین آمدن لبه نوار رسانش می شوند[۱۱]. این مدل از دقت بالایی برخوردار نیست و به همین دلیل اکثر اوقات از آن صرفنظر می شود.

مدل آلیاژ هم ریخت بر مبنای یک (یا تعداد اندکی) محیط اتمی جایگزیده که داخل ساختار آلیاژ توسعه یافته است، بنا شده اند. این مدلها شامل : مدل دافعه نواری (BAC)<sup>م</sup> مدل تقریب کریستال مجازی(VCA)<sup>4</sup> و تقریب پتانسیل همدوس(CPA)<sup>۲</sup> می باشند[۱]. این مدل ها قادر به توصیف برخی ویژگیهای ویژگیهای نیتروژن دارهای رقیق می باشند.

- \*\* Polymorphous Model
- Fo Band Anticrossing Model
- \* Virtuol Crystal Approximation
- <sup>FV</sup> Coherent Potentioal Approximation

<sup>&</sup>lt;sup>F1</sup> Photoluminescece

<sup>&</sup>lt;sup>FY</sup> Impurity Band Formation

<sup>&</sup>lt;sup>**FF**</sup> Isomorphus Modele

دقیق ترین تئوری برای شـرح این ترکیبات که با کمک مدل ابر شبکه اتمی<sup>۸</sup> بنا می شود[۱] مدل آلیاژ چند ریخت اســت. در این مدل Ga و As و اتم های نیتروژن ناخالصــی (با هر ترکیب بندی دلخواه به صورت جفت، خوشـه ...) در نقاط شــبکه قرار می گیرند و منجر به واهلش شــبکه<sup>۲۹</sup>می شـوند ، و معادله شرودینگر برای ترکیب بندی نهایی حل می شود. جواب های این معادله شرودینگر را می توان با استفاده از محاسـبات تابع چگالی در تقریب های چگالی محلی ، روشـهای محاسـبات تابعی چگالی در تقریب چگالی محلی(LDA-DFT)<sup>۱۰</sup>[LDA-DFT، روش بسـتگی قوی [۱۳] و یا روش شـبه پتانسـیل تجربی تصـحیح شـده(EPM)<sup>۱۰</sup> بدست آورد.

تا کنون مناسب ترین روش برای حل معادله شرودینگر آلیاژهای نیتروژن دار رقیق، روش EPM بوده است.

از میان مدل های هم ریخت مدل BAC توافق بیشــتری با مدل چندریخت دارد. البته ناتوانی BAC در توصیف کامل خصوصیات آلیاژهای نیتروژن دار رقیق سبب می شود که در برخی موارد از این مدل صرفنظر شود. مدل BAC در توصیف ویژگی های ذیل با مدل چندریخت همخوانی دارد[۱]:

.۱ حرکت روبه پایین تراز ₋E و حرکت روبه بالای تراز ⊧E با افزایش درصد N.

۲. توصیف برخی از ویژگی هاییGaNP و ۲۰۰۰

در مدل چندریخت محیط های اتمی متفاوتی (که بوسیله جفت ها و و خوشه های نیتروژنی ایجاد می شوند) در نظر گرفته می شود. توزیع غیر یکنواخت نیتروژن در آلیاژ سبب ایجاد نوساناتی در پتانسیل می

<sup>FA</sup> Atomistic Supercell

<sup>F9</sup> Lattice Relaxation

<sup>b</sup> Density Functional Calculation In The Local Density Approximation

<sup>51</sup>Empirically Corrected Pseudopotentials

<sup>52</sup> کاهش ضریب فشار و اشباع آن با افزایش درصد N، و افزایش جرم موثر الکترون در مینیمم نوار رسانش در اثر حضور N.

شود، که این نوسانات علت جایگزیدگی اکسیتون ها، شیفت استوک بین طیف جذب و نشر، و جابجایی آبی با افزایش دما در دماهای پایین می باشد؛ و مدل BAC برای این موارد توجیهی ارائه نمی دهد. با افزایش دما گاف نواری کاهش چشم گیری پیدا می کند که به علت کاهش جمعیت حالتها در GaAs و درون گاف نواری می باشد، که این موضوع نیز در مدل BAC پیش بینی نشده است. مدل چندریخت به وضوح نشان می دهد که تنها ۲ تراز مورد بحث در مدل BAC تحت تأثیر حضور N قرار نمی گیرند، بلکه وضعیت های میزبان L<sub>1</sub>C و X<sub>1</sub>c نیز آشفته می شوند[۱].

علی رغم همه تضادهای موجود، مدل BAC تا حد قابل قبولی قادر به توصیف ویژگی های ترکیبات -III N-V می باشد. و به همین دلیل در فصل های آینده به بررسی این مدل خواهیم پرداخت.

در اینجا مناسب است جهت آشنایی اجمالی با معروف ترین ترکیبات نیتروژن دار رقیق گروه ۱۱۰۷ ، به بررسی مشخصات ساختاری ترکیبات GaNAs و GaNA بپردازیم. آلیاژهای نیتروژن دار رقیق GaNAs و GaNAs نیمرساناهایی با ساختار شبکه بلوری زینک-بلند<sup>۲۰</sup> هستند. در شکل(۲-۲) ساختار بلوری GaNAs نشان داده شده است . در ساختمان این بلورها، تعدادی از اتم های N جانشین عنصر گروه ۷ ماتریس میزبان (As یا۹) می شود. الکترونگاتیویته و اندازه عناصرتشکیل دهندهٔ آلیاژهای نیتروژن دار رقیق در جدول(۲-۱)، و مشخصات شبکه بلوری آلیاژهای والد آنها در جدول(۲-۲) جهت مقایسه نشان داده شده است.



شکل (۲-۲) : ساختار بلوری GaNAs را نشان میدهد. توپ های سفید ، خاکستری(سبز) وسیاه(آبی) به ترتیب نشان دهنده As،Ga و هستند[۱۳].

|    | الكترونگاتيويته | شعاع كووالانسى (^A) |
|----|-----------------|---------------------|
| N  | ٣/١             | • /Y                |
| Р  | ۲/۱             | ۱/۱۰                |
| As | ٢               | ١/١٨                |

#### جدول(۲-۱): الكترونگاتيويته و اندازه عناصر P،N و AS [۱۴].

جدول(۲-۲): مشخصات شبکه بلوری آلیاژهای GaN، GaP، GaAs و Si].

|      | شبکه بلوری | ثابت شبکه (A <sup>o</sup> ) | انرژی گاف نواری(eV) |
|------|------------|-----------------------------|---------------------|
| GaAs | Zinc blend | ۵/۶۵۳۵                      | 1/4٣                |
| GaP  | Zinc blend | ۵/۴۵۰۶                      | ۲/۲۶                |
| GaN  | Wurtzite   | ٣/١٨٩                       | ٣/۴                 |
| Si   | Diamond    | ۵/۴۳۱۰                      | 1/11                |

همانطور که در جدول(۲-۲) نشان داده شده است، اختلاف شدیدی بین ساختار شبکه بلوری و گاف انرژی آلیاژهای اولیه (GaP وGaNs ) ونهایی (GaN) وجود دارد. به همین دلیل رشد آلیاژهای GaNAs و GaNA، برای دست یابی به بالاترین درصد نیتروژن مورد نظر در این آلیاژها، با مشکلاتی همراه است. رشد این ترکیبات باید در شرایط غیر تعادلی صورت پذیرد، که این نحوهٔ رشد سبب کاهش کیفیت اپتیکی آلیاژها می گردد. در فصول آینده به معرفی برخی از روشهای بهبود کیفیت اپتیکی این ترکیبات خواهیم پرداخت.

جهت برسی تاثیر حضور نیتروژن روی ساختار الکترونیکی گاف نواری، ساختار الکترونیکی گاف نواری، ساختار الکترونیکی گاف نواری آلیاژهای GaP ، GaAs در شکل (۲–۳) نشان داده شده است. همانطور که در شکل (۲–۳)الف مشاهده می فرمایید، GaAs نیمرسانایی دارای گاف نواری مستقیم و GaP نیمرسانایی دارای گاف نواری غیر مستقیم و GaP نیمرسانایی دارای گاف نواری غیر مستقیم و GaP نیمرسانایی دارای گاف نواری غیر مستقیم است. همانطور که در شکل تواری گاف نواری مستقیم و GaP نیمرسانایی دارای گاف نواری الکترونیکی گاف نواری گاف میزبان ، تقارن انتقالی بلور نواری غیر مستقیم است. همانطور که در شکل تواری غیر مستقیم است. همانایی دارای گاف نواری میزبان ، تقارن انتقالی بلور میزبان را بر هم می زند. ولی اگراتم ناخالصی هم ظرفیت عناصر شبکه میزبان باشد، تقارن نقاط شبکه میزبان را بر هم می زند. اگر یک اتم ناخالصی روی نقاط شبکه ساختار بلوری زینک بلند بنشیند ، تبهگنی تغییری نمی کند. اگر یک اتم ناخالصی روی نقاط شبکه ساختار بلوری زینک بلند بنشیند ، تبهگنی حمالتهای مختلف ساختار نواری میزبان شکسته می شود. به نحوی که تبهگنی چهارگانه  $I_{1c} + I_{2}(L_{1c})$ 





شکل(۲-۳): ساختار الکترونیکی گاف نواری آلیاژهای GaP، GaAs (قبل از حضور نیتروژن) و GaNP، GaNAs (بعد از حضور نیتروژن) [۱۸،۱۷،۵].

را ارائه می دهد. نوار انرژی کریستال  $t_2(X_3)$  را ارائه می دهد. نوار انرژی کریستال می نیتروژن دار رقیق تراز میزبان در مرتبه های بالاتر نیز دچار اختلال می شود. به عنوان مثال در آلیاژ های نیتروژن دار رقیق تراز میزبان در مرتبه های بالاتر نیز دچار اختلال می شود. به عنوان مثال در آلیاژ های نیتروژن دار رقیق تراز مربوط به نیتروژن های جایگزیده، در GaP زیر نوار کمینه رسانش و در GaAs بالای GaAs تشکیل می شود. این وضعیت های در اینجا (n) می شود. در اثر اختلال می شود. می نیتروژن های جایگزیده، در GaP زیر نوار کمینه رسانش و در GaAs بالای GaAs بالای می شود. این وضعیت ها در اینجا (n) می شود. این وضعیت ها در اینجا (n) می در این می شود. در اثر اختلال ایجاد شده، وضعیت هایی که دارای تقارن عارن وضعیت ها در اینجا (n) می در می کنند. هم وضعیت های  $n_1$  می مور جداگانه با همدیگر(

نیز با یکدیگر ( $X_{3c} + L_{1c}$ ) وارد بر هم کنش می شوند. همانطور که  $t_2$  نیز با یکدیگر ( $\Gamma_{1c} + L_{1c} + X_{1c}$ ) وارد بر هم کنش می شوند. همانطور که در شـکل (۲–۳) نیز نشـان داده شـده اسـت، ترتیب ترازهای مربوط به وضـعیت  $a_1$ در GaAs به صـورت در شـکل (T–۳) نیز نشـان داده شـده اسـت، ترتیب ترازهای مربوط به وضـعیت  $a_1$ در  $N_{1c} \to GaAs$  به صـورت  $X_{1c} \to L_{1c} \to T_{1c}$  به ترتیب  $T_{1c} \to L_{1c} \to X_{1c}$  قرار می گیرند (۵].

# فصل۳ مشخصات دستگاهی روش های مشخصه یابی

در این فصل به طور خلاصه به مشخصات نمونه های مورد مطالعه، و روشهای مورد استفاده در مشخصه یابی اپتیکی قطعات نیمرسانا که در این پایان نامه از آنها بهره گرفته ایم، اشاره می کنیم. هر یک از این روش ها برای بررسی ویژگی های خاصی از مواد مفید هستند، و هیچکدام به تنهایی قادر به مشخص کردن کامل همهٔ خصوصیات نیمرسانا نمی باشد.

## ۲-۱ مشخصات نمونه ها مورد مطالعه در این پایان نامه

در این پایان نامه به مطالعه خواص اپتیکی نیمرسانهای GaNAs، GaNAS و GaInNP می پردازیم. تمامی نمونه های مورد مطالعه، با روش روآراستی پرتو ملکولی (MBE)<sup>۹۴</sup> توسط گروه پروفسور تو<sup>۵۵</sup> و همکارانش در دانشگاه کالیفرنیا رشد داده شده اند. کلیه اندازه گیری ها درآزمایشگاه فوتولومینسانس دانشکده فیزیک و سنجش اندازه گیری دانشگاه لینشوپینگ در کشور سوئد توسط استاد راهنمای اینجانب، جناب آقای دکتر ایزدی فرد انجام گردیده است.

<sup>۵۴</sup> Gas–source MBE

<sup>ΔΔ</sup> C.W.Tu

الف) نمونه های \*۲۹۰۰ های ۲۰۱۰ (مسید این نمونه ها، از ساختارهای نیمه عایق (SI) GaAs بدون آلایش، که به روش روآراستی پرتو مولکولی با منبع گازی رشد داده شده است، به عنوان زیر لایه <sup>۵۶</sup> استفاده شده است. طرحی از این نمونه ها در شکل(۳–۱) نشان داده شده است. درصد نیتروژن نمونه ها (x) از طریق اندازگیریهای پراش اشعه X بدست آمده است. کیفیت ساختاری نمونه ها بوسیله میکروسکوپ الکترون عبوری (TEM) تخمین زده شده است، و هیچ نوع جداشدگی<sup>۷۵</sup> و در رفتگی<sup>۸۵</sup>یافت نشده است، که این موضوع اشاره به کیفیت بالای نمونه ها دارد. این نمونه ها شامل نانو ساختارهای چاه کوانتومی چندگانه ۰٫۲۵×٬۵۵ مهراره به کیفیت بالای نمونه ها دارد. این نمونه ها شامل نانو ساختارهای چاه کوانتومی چندگانه ۰٫۲۵×٬۰۰۰ (مهر) با ٪۱/۱، ٪۲/۱ و ٪۲ نیتروژن، و ساختارهای لایه روآراستی GaAs (GaAs با ٪٬۰۰۰، ٪٬۵۰، ٪٬۷۰

| (الف)   |   |  |  |  |
|---|---|--|--|--|
| GaAs cap layer  | 50 nm   |  |  |  |
| GaAs barrier<br>GaN <sub>x</sub> As <sub>1-x</sub> well | $\begin{bmatrix} 20.2 & nm \\ 7 & nm \end{bmatrix}$ 7 periods |  |  |  |
| GaAs buffer   | <b>250</b> nm   |  |  |  |
| SI-GaAs substrate                                       |   |  |  |  |

| (پ)   |  |  |  |
|---|--|--|--|
| GaAs cap layer 20 nm                            |  |  |  |
| GaŊ <sub>k</sub> As <sub>1-x</sub> layer 110 nm |  |  |  |
| GaAs buffer 250 nm                              |  |  |  |
| SI-GaAs substrate                               |  |  |  |

شکل (۳-۱): الف- چاه کوانتومی چند گانه GaN×As1-x/GaAs و ب- لایه رونشانیGaN×As1-x/GaAs

جهت بررسیی اثر عملیات حرارتی سریع(RTA)<sup>۵۹</sup> پس از رشد گروه های دیگری از نمونه ها مورد بررسی قرار گرفته اند. یک گروه از نمونه ها در دمای پایین(C<sup>o</sup> ۴۲۰)، و گروه دیگر در دمای بالاتر(C<sup>o</sup> ۵۸۰)، رشد داده شده اند. در هرگروه، هر دو نوع ساختار، چاه کوانتومی چندگانه و لایه روآراستی وجود دارد. همه نمونه ها دارای لایه پوششی GaAs به ضخامت ۱۰ می باشند، و درصد نیتروژن نمونه ها بین٪ x < ۳/۳

<sup>69</sup> Substrate

- <sup>۵</sup> Separation
- <sup>AA</sup> Dislocation foramation
- <sup>64</sup>Rapid thermal annealing
>./ ۲/ ۱متغیر است. عملیات RTA بعد از رشد نمونه ها در محیطی حاوی N₂ در دمای ۵۰۰۵ به مدت ۱۰۶ توسط لامپ های هالوژنی انجام شده است. در طول عملیات حرارتی سریع، نمونه ها روی ویفر GaAs به صورت رو در رو قرار گرفتند، تا از خروج آرسنیک در اثر افزایش دما جلوگیری شود.

ب) نمونـه هـای «۲۰۰ نمونه های لایه روآراسـتی GaNP مورد مطالعه در این پایان نامه در راسـتای (100)روی زیر لایه GaP رشـد داده شـده، و دارای لایه میان گیر<sup>۲۰</sup> GaP با ضـخامت ۲۰۰ نانومتر هسـتند. ضـخامت لایه های روآراسـتی سـاختار حجمی GaNP رشـد داده شده ۲۵۰-۲۵۰ نانو متر میباشد. درصد N نمونه ها که با استفاده از اندازه گیری های پراش اشعه ایکس تعیین شده اند ۲/۱۰ –۲۰۵٬۰میباشد. نمونه های چاه کوانتومی مورد مطالعه، ساختارهای چاه Y دوره ای GaNP/GaP می و ۷/۲۰ میران دهنده در رفتگیها در این نمونه ها که توسـط میکروسکوپ الکترون عبوری اندازه گیری شده اسـت نشان دهنده کیفیت بالای نمونه ها است.

جهت بررسی اثر عملیات حرارتی پس از رشد، و همچنین اثر زیر لایه Si روی کیفیت اپتیکی نمونه ها گروه دیگری از نمونه ها مورد مطالعه قرار گرفته است. نمونه های GaNP مورد مطالعه جهت بررسی اثر RTA روی زیر لایه GaP و نمونه های مورد مطالعه جهت بررسی اثر زیر لایه Si روی زیر لایه GaP در راستای (100) رشد داده شده اند. ضخامت لایه های روآراستی ساختار حجمی GaNP رشد داده شده ۱۵۰۰ نانو متر میباشد. درصد N نمونه ها که با استفاده از اندازه گیری های پراش اشعه ایکس تعیین شده اند ۱۸۰۳ ، ۸٫۸٪ و ۲٫۸٪ می باشد. چگالی در رفتگیها در این نمونه ها که توسط میکروسکوپ الکترون عبوری اندازه گیری شده است با افزایش در صد نیتروژن کاهش می یابد.

ج) **نمونه های ۲۰۰ نمونه های (Gal--vinyNxP**1-x نمونه های لایه روآراستی Ga<sub>1-v</sub>InyNxP<sub>1-x</sub> مورد مطالعه در دمای C ۴۶۰ روی زیرلایه نیمه عایق GaAs رشد داده شده، و دارای لایه میان گیر GaAs با ضخامت ۱۰۰ نانومتر هستند. ضخامت لایه های روآراستی nm ۲۳۵ می باشد. نمونه ها حاوی ٪۵۳ ایندیم(In) بوده، و درصد نیتروژن آنها که با استفاده از اندازه گیری های پراش اشعه ایکس تعیین شده است ٪۰۰، ٪ ۰/۵۰، ٪۱ و ٪۲ می باشد.

# ۳–۲ فتولومینسانس(PL)

با روشهای مختلفی می توان انرژی لازم برای برانگیخته شدن الکترونهای نوار ظرفیت را تامین کرد ولي در نهايت اين الكترون براي برگشـتن به سـطح پايين ترين انرژي با تابش يک فوتون با جاي خالي خود در نوار ظرفیت (حفره) بازترکیب می شوند. بدین گونه بازترکیبهای تابشیی که از انتقال یک الکترون برانگیخته به حالت پایه صورت می گیرد، لومینسانس ۶ گفته می شود. اصطلاح لومینسانس از واژه لاتین لومن به معنای نور گرفته شده است. این اصطلاح نخستین بار توسط فیزیکدانی به نام ویدمن ۶۰ برای توصیف تمام یدیده های نوری که صـرفا به علت افزایش دما به وجود نیامده اند معرفی شـد. به منظور حفظ بقای انرژی، برای ایجاد برانگیختگی لازم است تا از طریق یک منبع تحریک خارجی، انرژی تزریق گردد. برانگیختگی ایــــــجــــاد جــــريــــان ازط\_\_\_\_\_ري\_\_\_\_ق الكتريكي،الكترولومينسانس، با استفاده از باريكه الكتروني، كاتودولومينسانس، با ايجاد گرما ، ترمولومينسانس، و گسیل نور با استفاده از یک فرایند شیمیایی،لومینسانس شیمیایی نامیده می شوند. آنچه که در این بخش برای ما مهم و مورد توجه است، برانگیختگی با ایجاد منابع نوری است که فتولومینسانس گفته می شود. در یک آزمایش فتولومینسانس از یک منبع نوری که معمولاً لیزر است برای برانگیخته کردن نمونه استفاده می شـود. لیزر باعث تولید زوج الکترون و حفره در نمونه میشـود. برای برانگیخته کردن الکترون باید از لیزری استفاده کنیم که فوتون های گسیلی توسط آن دارای انرژی بزرگتری از گاف انرژی ماده تحریک شده باشد. الكترونهاى برانگيخته بخاطر خاصيت طبيعي خود تمايل دارند تا به حالت حداقل انرژى بازگردند. اين

<sup>\*</sup>Luminescence

<sup>۶۲</sup> Widemann

ب\_\_\_از ت\_\_\_ ک عــــنـــوان تــحــت کـــه ب\_\_\_\_از گش\_\_\_\_\_\_ شد، باعث تابش فوتون از نمونه خواهد شد. با جمع آوری لومینسانس تولید شده و ذخیره آن بصورت تابعی از طول موج فوتون ساطع شده بر حسب شدت، یک طیف فتولومینسانس خواهیم داشت. انرژی فوتون ساطع شده بیانگر مشخصه فرآیند بازترکیب نوری الکترون خواهد بود و با تجزیه و تحلیل طیف فتولومینسانس، دانش ما درباره ساختار و رفتار نمونه در شرایط مختلف افزایش می یابد. نکته مهمی که در هنگام اندازه گیری فوتولومینسانس باید درنظر داشت این است که برای داشتن قله فتولومینسانسی تیزتر و واضحتر باید دمای نمونه پایین باشد. طیف فتولومینسانس در دماهای بالاتر بخاطر برهمکنشهای قوی بین الکترون و ارتعاشهای شبکه (گرما) پهنتر می شود و از طرفی، در دماهای بالاتر باز ترکیبهای غیرنوری غلبه یافته و مطالعه باز ترکیبهای نوری را با مشکل مواجه میکنند. پیکربندی نوعی آزمایش فتولومینسانس در شکل(۳–۲) نشان داده شده است در اندازه گیری های PL مربوط به این پایان نامه، از خط طیفی ۵۱۴ نانومتری گسیلی از یک لیزر یونی آرگون†Ar برای تحریک نمونه ها استفاده شده است . طیف PL حاصل از نمونه های GaNAs پس از عبور از یک



•

شکل(۳-۲): پیکربندی نوعی آزمایش فتولومینسانس

تکفام سـاز دو گانه توسـط آشکارسازهای Ge(برای نمونه GaNAs) ، فوتومولتی پلایر(PMT) (برای نمونه های GaNP وGaInNP) و Si(برای نمونه هایGaInNP) ثبت شده اند.

# ۳-۳ فتولومینسانس تحریکی(PLE) <sup>۶۳</sup>

این تکنیک بر اساس طیف جذبی است. آشکارساز در یک طول موج معین و به صورت ثابت لومینسانس را اندازه گیری می کند در حالیکه نور فرودی در یک گستره طول موجی وسیع تغییر داده می شود به ازای طول موج معینی، آشکار ساز خروجی بیشینه سیگنال را ثبت می کند. در این روش بر خلاف روش PL که معمولاً در طیف فرآیندهای بازتر کیب قوی تر نمایان هستند و فرآیندهای ضعیف تر حذف می شوند، هر فرآیندی حتی بازتر کیب های ضعیف را می توان آشکار سازی کرد.

در اندازه گیری های PLE مربوط به نمونه های GaNP، از یک لامپ ۱۵۰ واتی زنون به همراه تکفام ساز استفاده کرده ایم. اندازه گیری های PLE در دمای ۲ کلوین انجام شده است.

# <sup>64</sup>(TRPL) فتولومینسانس وابسته به زمان (TRPL)

در این روش از لیزر پالسی قابل تنظیم برای تحریک نمونه استفاده می شود. لیزر در مدت زمان کوتاهی در حدود T1 (نانو) ثانیه روی نمونه اعمال میشود و سبب برانگیختگی الکترون ها می گردد. سپس در مدت زمانی در حدود T2 میکروثانیه نمونه را به حال خود رها می کنند. با توجه به اینکه فتولومینسانس این نمونه ها در چه بازه زمانیی میرا میشود بنابراین محدوده زمانی اندازگیری خود را در بازه زمانی چند نانو ثانیه پس از زمان برانگیختگی قرار می دهیم .در حقیقت در طی این زمان همواره فتولومینسانس داریم، فقط شدت آن کاهش می یابد. میزان شدت همواره با تعداد بازترکیب ها متناسب است. بنابراین هرچه شدت فتولومینسانس سریع تر کاهش یابد به این معناست که، سرعت بازترکیب ها بیشتر بوده است.در نتیجه با

#### <sup>97</sup> Photoluminescence Excitation

#### <sup>\*\*</sup> Time Resolved Photoluminescence

استفاده ازشیب منحنی شدت – زمان می توان به معیاری برای فتولومینسانس نمونه دست یافت. در واقع شیب منحنی فتولومینسانس دقیقا با میرایی آن نسبت مستقیم دارد. در تمام مدت زمان مورد بحث، یعنی چه زمان برانگیختگی وچه زمان رهاسازی نمونه ، شدت فتولومینسانس ثبت میشود. با ثبت شدت فتولومینسانس حاصل از هر نمونه در بازه طول موجی انتخاب شده، طول موج وزمان واهلش برای آن نمونه راخواهیم داشت. پیکربندی نوعی آزمایش TRPL در شکل(۳–۳) نشان داده شده است. در شکل(۳–۴) نیز طرحی شاتیک از بازه زمانی مربوط به لیزر پالسای استفاده شده در آزمایش TRPL نشان داده شده است. در اندازه گیریهای است.زمان برانگیختگی به صورت اغراق آمیز در مقایسه با زمان رهاسازی رسم شده است. در اندازه گیریهای TRPL این پایان نامه، از پالس های فمتوثانیه یک لیزر حالت جامدTRP استفاده شده است. در اندازه گیریهای



شکل(۳-۳): پیکربندی نوعی آزمایش فتولومینسانس وابسته به زمان [۱].



شکل(۳-۴): مقایسه نمادین از زمان برانگیختگیT1 وزمان رهاسازی T2 در لیزر پالسی مورد استفاده در اندازگیری TRPL.

# ۳-۵ آزمایش جذب و اندازگیری ضریب جذب

انداز گیری ضریب جذب یک نیمرسانا به صورت طرحوار در شکل(۳–۵) نشان داده شده است. نور از منبعی با طول موج متغیر یا تکفام ساز، به نمونه می تابد. بخشی از نور جذب می شود وشدت نور عبور داده شده بوسیله دتکتور انداز گیری می شود. ضریب جذب طبق رابطه(۳–۱) به میزان کاهش شدت نور وابسته است.



شکل(۳-۵) : نمودار شماتیکی از آزمایش اندازگیری ضریب جذب[۱].

$$\alpha = -\frac{1}{\widetilde{S}} \frac{d\widetilde{S}}{dx} \tag{1-7}$$

$$-\frac{d\widetilde{S}}{dx} = \alpha \widetilde{S}(x) \tag{7-7}$$

$$\widetilde{S}_{d} = \widetilde{S}_{i} e^{-\alpha x} \tag{(f-r)}$$

 $\widetilde{\mathbf{S}}(\mathbf{x}) - \widetilde{\mathbf{S}} e^{-\alpha \mathbf{x}}$ 

در رابطه های فوق  $\tilde{S}$ شـدت نور فرودی ، b ضخامت نمونه و  $\tilde{S}$  شدت نور عبوری از نمونه می باشد. مقدار  $\alpha$  به انرژی فوتون وابسـته اسـت. تا زمانی که انرژی فوتون های فرودی کمتر از انرژی گاف نواری نیمرسانا،  $\alpha$  به انرژی فوتون وابسـته اسـت. تا زمانی که انرژی فوتون های فرودی کمتر از انرژی گاف نواری نیمرسانا،  $F_s = \hbar \omega < E_s$  مهر ، باشـد ، نور بدون تضعیف شدت از ماده عبور کرده، و  $0 \approx \alpha$  خواهد بود. با افزایش انرژی فوتون ها ،  $\alpha$  در اثر حضـور ترازهای کم عمق ناخالصـی شـروع به افزایش کرده، و با رسـیدن انرژی فوتون ها به انرژی گاف نواری ناگهان به سرحد بیشینه خود می رسد. بیشینه نمودار جذب در انرژی g رخ میدهد[۱]. با اسـتفاده از رابطه ضـریب جذب با انرژی گاف نواری، گاف نواری نیمرسـاناها قابل محاسبه است. وابستگی طیفی ضریب جذب به انرژی فوتون ها، در نیمرساناهای دارای گاف نواری مستقیم به صورت رابطه ذیل می باشد[۲]:

(۵-۳)

( W W)

$$\alpha(\hbar\omega) = A \frac{\sqrt{2}(m_r^*)^{\frac{3}{2}}(\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}}{\pi^2\hbar^3}$$
$$A = \frac{\pi e^2\hbar}{m_0^2 c n_r \varepsilon_0} \frac{1}{\hbar\omega} \left| \vec{a}.\vec{p}_{if} \right|^2$$

در نیمرساناهای گاف غیرمستقیم، پروسه جذب فوتون با گسیل یا جذب فونون همراه است. به همین علت برای محاسبه ضریب جذب احتمال هر دو فرایند جذب وگسیل فونون باید لحاظ شود.

در فرایند جـذب اگر  $E_{g} - E_{g} - E_{g}$  الکترون با جذب یک فونون به نوار رسـانش می رود. در این حالت ضریب جذب با رابطه زیر بیان می شود[۱]:

$$\alpha_a(\hbar\omega) = \frac{A(\hbar\omega - E_g + E_P)^2}{\exp(\frac{E_P}{KT}) - 1}$$
(8-7)

ولی اگر  $E_g + E_p = E_g + E_p$ باشـد، احتمال رخ دادن هرکدام از فرایندهای جذب یا گسیل فونون وجود دارد. در این حالت ضریب جذب با رابطه(۲–۷) بیان می شود [۱]:

$$\alpha(\hbar\omega) = \alpha a(\hbar\omega) + \alpha e(\hbar\omega) \tag{Y-T}$$

$$\alpha_{e}(\hbar\omega) = \frac{A(\hbar\omega - E_{g} - E_{P})^{2}}{1 - \exp(-\frac{E_{P}}{KT})}$$

بنابراین با بررسی نتایج آزمایشات جذب، می توان گاف نواری نیمرساناها را با دقت بالایی تعیین نمود.

# فصل ۴

# مطالعه اپتیکی سیستم GaN<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub>

◄ بررسی ساز و کار بازترکیب تابشی ◄ وابستگی دمایی گاف نواری آلیاژ GaNAs ◄ تاثیرات عملیات RTA روی آلیاژهای کپه ای و نانوساختار GaNAs ◄ بررسی مدل برهمکنش دافعه نواری در آلیاژهای GaNAs وتاثیر RTA روی پارامترهای این مدل

جهت مطالعه فرآیند های باز ترکیب تابشی در «GaN<sub>x</sub>Ası»، طیف های فوتولومینسانس این ماده را بر حسب درصد های مختلف نیتروژن در سـه محدوده : ۱- ناخالصی<sup>۶۵</sup> (٪۲۰/۰)، ۲- ناخالصی- آلیاژ ( ٪۲/۰>۸×>/۲/۱) و۳- محدوده آلیاژ (٪۱<(x) [۱] بررسی می نماییم، همچنین وابستگی دمایی گاف نواری این ماده را مورد مطالعه قرار داده، و به دنبال ان به مطالعه تاثیرات عملیات حرارتی سریع روی نانوساختارها

<sup>90</sup> Impurity

و ساختارهای لایه ای این ترکیبات خواهیم پرداخت. در انتها نیز نتایج محاسبات پارامترهای معادله BAC برای نمونه های مورد مطالعه GaNAs مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

# ۴-۱ بررسی ساز و کار بازترکیب تابشی

# $x_N < \cdot / \cdot 1$ . محدوده 1-1-۴

در آلیاژهای رایج هم ظرفیت<sup>۶۶</sup> مانند <u>Ga</u>As: n، Ga<u>As</u>: P (اتم ناخالصی جایگزین اتمی می شود که زیر آن خط کشیده شده است) ، اختلال ایجاد شده توسط اتم های ناخالصی در پتانسیل میزبان ۷<sub>As</sub>-۷<sub>P</sub> یا PLE بسیار ضعیف تر از آن است، که بتواند وضعیت مقیدی در گاف نواری ایجاد کند. ولی طیف IL آلیاژهای Ga<u>As</u>: N نشان می دهد که مراکز مربوط به آنیون های نیتروژن ایزوله، که جانشین آنیون شبکه بلوری شده اند، یک تراز در گاف نواری ایجاد می کنند. این تراز به صورت تراز اکسیتون های مقید به ناخالصی در GaNAs در ۱۸۰meV بالای مینیمم نوار رسانش( سانش To meV) ظاهر می شود [۳،۲].

در طیف های PL آلیاژهای این محدوده نیز، حضور نیتروژن با خطوط تیزی که در طیف PL ظاهر می شوند بروز میکند. احتمالا این خطوط از باز ترکیب اکسیتون های مقید به جفتهای اتمی نیتروژن ناشی شده اند[۱]. متاسفانه طیفهای PL و PLE آلیاژهای این محدوده را در اختیار نداشتیم.

#### $x_N \approx 1$ محدوده ۲-۱-۴

تحولات مشاهده شده در این محدوده عبارتند از :

\*\* Isovalent

۲-۱-۴ خطوط تیز PL ناشی از خوشه های ناخالصی

با ایجاد هر نوع جانشینی ناخالصی ها در نقاط شبکه بلوری، امکان تشکیل اتفاقی جفت ها یا خوشه های ناخالصی فراهم می شود. در آلیاژهای ۷-۱۱۱ رایج، این جفت ها ترازی در گاف نواری ایجاد نمی کنند[۴]. ولی در GaNAs جفت های N-N به صورت ترازهای مجزا داخل گاف نواری ماده میزبان توسعه می یابند. وجود این جفت ها در GaAs در پایین نوار سانش در ۱۰ meV – ۲۵ [۵] و یا در ۸۰ meV – ۲۰ هری ارش شده است[۶]. وجود چنین خوشه هایی در آلیاژهای رایج به غیر از نیترایدها گزارش نشده است؛ و روش شده است[۶]. وجود این خوشه هایی در آلیاژهای رایج به غیر از نیترایدها گزارش نشده است؛ و روش EPM نیز وجود این خوشه ها را پیش بینی کرده است[۶]. به عنوان مثال در شکل (۴–۱۰) طیف PLساختارهای لایه روآراستی GaNAs بادرصد های



شکل(۴-۱): طیفهای PL مربوط به ساختارهای لایه روآراستی GaNAs با درصدهای امتفاوت نشان داده شده است.فلشها نشان دهنده موقعییت انرژی ترکیبات نیتروژنی هستند[۷].

N متفاوت (گروه هارماند<sup>۶۷</sup>[۷]) نشان داده شده است. طیف PL ساختار GaN<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub> با (٪ x = ۰/۰۲۳) از مجموعه ای از پیک ها تشکیل شده است که زیر گاف نواری GaAs که در ۱/۵ meV(انرژی

<sup>9</sup> J.C. Harmand

گاف نواری از طریق آزمایش جذب به دستآمده است[۷]). واقع شده است، قرار گرفته اند. حضور این پیکها در طیف PL بسیاری دیگر از نمونه های GaNAs با درصد های نیتروژن مشابه، که تحت شرایط متفاوتی رشد داده شده اند، تایید شده است[۸و۹] . به علاوه حضور این ساختارها از طریق محاسبات شبه پتانسیل، توسط کنت و زونگر<sup>۸</sup>۶، پیش بینی شده است[۱۰]. تعداد همسایگان نزدیک و فاصله بین اتم های نیتروژن در مراکز این خوشه ها ، انرژی بستگی اکسیتون ها را تعیین می کند[۷]. همانطور که در شکل(۴–۱)ب و(۴–۲) مشاهده می شود، با افزایش درصد N چگالی خوشه های نیتروژنی افزایش می یابد، و همپوشانی برخی تابشها منجر به پهن شدن طیف می گردد.



شکل(۴–۲) طیفهای PL وابسته به ساختار، مربوط به آلیاژهای لایه روآراستی «-GaNxAsı بادرصدهای مختلف N، که از نمونه های مورد مطالعه در این پایان نامه نشان داده شده است.

# ۴-۲-۲-۲ تثبیت انرژی جفت های ناخالصی

68 Kent and Zunger

مکان انرژی خطوط نشری که مربوط به جفت های ناخالصی می باشند، با افزایش درصد ۸در ترکیب [۱۱]GaAS:N حدس زد که ناخالصی ها با هم برهم کنش نمی کنند. با افزایش بیشتر درصد ۸ ، خطوط ۲L ناشی از جفت ها غیر متقارن شده، و یک قطع تیز در بخش پر انرژی، و دنباله نواری در بخش کم انرژی ظاهر می شود. باافزایش درصد ۸ به تدریج همه خطوط ناشی از جفت ها وخوشه ها ناپدید شده، و یک قله پهن آشکار شود. باافزایش درصد ۸ به تدریج همه خطوط ناشی از جفت ها وخوشه ها ناپدید شده، و یک قله پهن آشکار می شود. این رفتار بر خلاف رفتار رایج در میان آلیاژهااست. در سایر آلیاژها خط مربوط به یک ساختار در همهٔ درصدهای آلیاژ دیده می شود. ولی همانگونه که در شکل(۲-۲) مشاهده می شود در آلیاژهای GaNAs موقعیت انرژی قله ها به درصد۸ وابسته نیست؛ و با افزایش درصد نیتروژن فقط شاهد حذف قله ها هستیم و مکان پیک ها با افزایش غلظت ۸ جابجا نمی شود [۱۲]. تابشهایی که طیف ۲ آلیاژهای این محدوده را تولید کرده اند، احتمالا از فرار اکسیتونهای جایگزیده در تراز های کم عمق وابسته به خوشه های نیتروژنی، منشاء گرفته اند [۱۳]. با توجه به شـکل (۴-۲) با افزایش درصد نیتروژن، خط های مربوط به حلیه ی تروژنی، منشاء کرفته اند [۱۳]. با توجه به شـکل (۴-۲) با افزایش درصد نیتروژن، خط های مربوط به حالتهای عمیق تر مرطیف ۲ ناپرید می شوند . روند ناپدید شدن از قله های با انرژی بالاتر آغاز می شود، و علت این پدیده کرهش گاف نواری آلیاژ با افزایش درصد نیتروژن، می باشد.

#### > $x_N$ 1% محدوده -1-4

در این محدوده همه خطوط تیز ناشی از جفت ها و خوشه ها ناپدیدشده و در مجموع ، خواص جالبی باقی می ماند.

همانطور که در شکل(۴–۳) نشان داده ایم، در این مرحله قله های ساختار نامشخص در طیف PL ظاهر می شوند. این طیف های PL ، احتمالا از بازترکیب تابشی اکسیتون های به دام افتاده در



شکل(۴-۳): طیفهای PL (خط پر) و PLE (نقطه چین) ثبت شده مربوط به ساختارهای چاه کوانتومی چندگانه GaNxAs1-x مورد مطالعه در این پایان نامه نشان داده شده است. به منظور سهولت در انجام مقایسه، طیفهای مربوطه در راستای عمودی جابجا شده اند. جابجایی قرمز واضحی در گاف نواری با افزایش درصد N در طیفهای PLE مربوطه مشاهده میشود. فلش ها نشان دهنده افزایش جابجایی استوک با افزایش درصد Nمی باشند.

افت و خیزهای پتانسیل<sup>۴۹</sup> لبه گاف نواری ایجاد شده اند . این استنتاج بر مشخصات نهادینه طیف PL ،که برای ساختارهای لایه ای و چاه کوانتومی چندگانه GaNAs کاملا همسان است ، و در ادامه می آید، بنا نهاده شده است [۸].

#### PL ا−۳−۱ شکل نا متقارن طیف های

در این محدوده، شکل طیف PL دمای پایین آلیاژهای GaNAs بسیار نامتقارن است.همانطور که در شکل(۴–۴)الف مشاهده می شود، در این طیف ها ، یک دنباله در انرژی های پایین و یک قطع تیز در انرژی های بالا (که با افزایش قدرت تحریک جابجا می شود) دیده میشود. علت رفتار نمایی

<sup>94</sup>Fluctuation Potential



Eo شکل(۴–۴) الف– طیف PL نمونه های مورد مطالعه ساختارهای چاه کوانتومی چندگانه GaN0.016AS0.984 در دمای پایین. ب– محاسبه Eo همین نمونه از طریق محاسبه شیب دنباله نواری.

دنباله نواری طیف PL در انرژی های پایین، افت و خیزهای کاتوره ای نوار رسانش آلیاژ است که دارای چگالی توزیع نمایی می باشند. شیب دنباله نواری نمودار PL از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$E_0 = \left(\frac{d\ln I(h\nu)}{d(h\nu)}\right)^{-1} \tag{1-F}$$

با استفاده از این رابطه می توانیم میزان افت وخیزهای پتانسیل(که عامل جایگزیدگی اکسیتونی هستند) را تخمین بزنیم <sup>.۷</sup>. اندازه  $E_0$  با افزایش درصد نیتروژن افزایش می یابد و شدیداً به شرایط رشد وابسته است .

با توجه به رابطه (۴–۱)،از طریق رسم طیف PL نمونه مورد مطالعه چاه کوانتومی GaN<sub>0.016</sub>As<sub>0.984</sub> در مقیاس لگاریتمی ، و بدست آوردن شیب دنباله نواری نمودار (شکل (۴–۴)ب) مقدار mev  $GaN_{0.016}As_{0.984}$  در مقیاس لگاریتمی ، و بدست آوردن شیب دنباله نواری نمودار (شکل (۴–۴)ب) مقدار  $E_0 = 1۲۵$  $E_0 = 1۲۵$  را بدست آوردیم. البته مقادیرگزارش شده  $E_0$  برای لایه های روآراستی رشد داده شده، بین  $E_0 = -9$  mev

<sup>&</sup>lt;sup>۰۰</sup> البته ممکن است بازتر کیب اکسیتون های جایگزیده در ترازهای عمیق تر وابسته به خوشه های N تا حدودی روی مقدار عددی این پتانسیل تاثیر بگذارد[۱].

تحت عملیات حرارتی سریع<sup>۱۷</sup> قرار گرفته اند بین ۱۵ me۷ می باشد [۱۵و۱۶]. قطع تیز انرژی متناظر با لبه تحرک است،که جدا کننده حالات جایگزیده از حالات غیر جایگزیده می باشد [۱۷].

جهت مقایسه اثر رشد، طیف PL نمونه های گروه دومنت<sup>۲۷</sup>[۱۸]، که ساختارهای لایه روآراستی و چاه کوانتومی یگانه با روش رشد روآراستی فاز بخار با ترکیبات آلی – فلزی<sup>۳۷</sup> می باشند، در شکل (۴–۵) آمده است . در شکل (۴–۵)الف عدم تقارن در نمودار PL در PV V مشاهده می شود، که مربوط به تابش های ناشی از اکسیتون های مقید به لبه گاف نواری نمونه لایه روآراستی GaN0.0165AS0.9835 میباشد. در شکل (۴–۵)ب مشاهده میشود که، قله انرژی PL چاه کوانتومی یگانه (SQW) GaN0.025AS0.975/GaAs در PL در ۲۰۱۰، و قله انرژی PL چاه کوانتومی یگانه GaN0.025AS0.975/GaAs در PL را میا در ۲۱۹ در ۲۹ ۲/۱۰ و میباشد. در شکل



شکل(۴-۵) : طیفهای PL ( اندازگیری شده در دمای ۱۰ °k) ساختارهای: الف- نمونه لایه روآراستیGaN0.0165AS0.9835 و ب- نمونه های چاه کوانتومی یگانه GaN0.025As0.975/GaAs و GaN0.035AS0.965/GaAs [۸۸].

#### ۳۱ RTA

#### <sup>vr</sup> H. Dumont

<sup>vr</sup> Metal Organic Vapour Phase Epitaxy (MOVPE)

اثر حبس کوانتومی در چاه ، تقارن نمودارهای PL نمونه های SQW بهبود یافته است[۱۸]. بنابراین خصوصیات طیف PL در این محدوده تحت تاثیر روش رشد قرار نمی گیرد.

#### PLE, PL جابجایی استوک بزرگ بین طیف PLE

در آلیاژهای نیمرساناهای ۷-۱۱۱ دارای گاف نواری مستقیم، که از کیفیت بالایی برخوردار باشند، جذب و نشر تقریبا در یک انرژی رخ می دهد. در مقابل در آلیاژهای GaNAs که درصد نیتروژن آنها در این محدوده قرار دارد، انرژی خطوط طیف نشری نسبت به خطوط طیف جذبی[۱۹]، جابجایی قرمزدارد، و با افزایش غلظت این جابجایی افزایش می یابد(شـکل(۴–۳) و(۴–۶))[۶]. همان طور که اشـاره شـد به این جابجایی انرژی، جابجایی استوک گفته می شود. طیف PLE اساساً وابسته به حالت های توسعه یافته<sup>۹۷</sup> است، در حالی که طیف LT ناشی از حالت های جایگزیده<sup>۵۷</sup> می باشد. بنا براین اختلاف انرژی بین قله طیف های PLE و PL می تواند معیاری ازمیزان انرژی جایگزیدگی

<sup>&</sup>lt;sup>ve</sup> Extended states

Vo Localized states



شکل(۴-۶): جابجایی استوک بزرگ بین طیف PLE , PL نمونه چاه کوانتومی چندگانههGaN0.016AS0.984 مورد مطالعه. حاملهای شرکت کننده در فرایند بازترکیب تابشی باشد. جابجایی استوک بزرگی که در شکل(۴-۶) مشاهده می شود، نشان دهنده انرژی جایگزیدگی بزرگی برای حامل های جایگزیده در ترازهای وابسته به N می باشد . مقدار ایــــــن جابجایی را برای نمونه مورد مطالعه چاه کوانتومی GaN0.016AS0.984 در دمای پایین تقریبا ۷۵ meV بدست آوردیم.

این میزان انرژی پتانسیل جایگزیدگی بسیار بزرگتراز سیستم های رایج آلیاژهای متعارف ، که معمولاً بین ۷ me۷ تا ۷ me۷ است، می باشد. این جایگزیدگی بزرگ تا حدودی در اثر شرایط رشد در دمای پایین(شرایط رشد غیر متعادل) ایجاد میشود، و بدیهی است که با افزایش دمای رشد یا موثرتر از آن، با عملیات حرارتی سریع پس از رشد احتمال کاهش آن وجود دارد . هرچند پتانسیل جایگزیدگی حتی پس از عملیات حرارتی سریع نیز، بسیار بیشتر از مقدار آن در سیستمهای سایر آلیاژهای متعارف باقی می ماند.لازم به ذکر است که جابجایی استوک در آلیاژهای محدوده دوم نیز مشاهده می شود[۱۹].

#### PL وابستگی دمایی طیف

دراین قسـمت تغییر موقعیت انرژی پیک PL نمونه های GaNAs با افزایش دما را بررسـی می کنیم همانطور که در شکل(۴–۷) نشان داده شده است، در دماهای پایین با افزایش دما، شاهد جابجایی قرمز قله های PL هسـتیم. این موضوع نشان دهنده کم شدن جمعیت اکسیتون های جایگزیده ای است که از کم عمق ترین پتانسـیل های جایگزیده منشـأء می گیرند. با افزایش دما اکسـیتون های جایگزیده در پتانسیل های کم عمق نزدیک تر به لبه نوار رسانش، با جذب انرژی گرمایی به حالت های غیر جایگزیده می روند و آزاد می شـوند، و بنابراین قله حالت جایگزیده وابسته به آنها درنمودار PL حذف می شود (این فرایند به صـورت نمادین در شـکل(۴–۷)چ نشـان داده شـده اسـت). این اکسـیتون ها می توانند در فرایند های بـازتـرکـییـب





شکل(۴-۲): الف- وابستگی دمایی طیف PL مربوط به ساختار لایه روآراستی GaN 0.013AS 0.987 /GaAs (نمونه مورد مطالعه در این پایان نامه ). همه طیفها نرمالیزه شده اند و به منظور سهولت مقایسه در جهت عمودی جابجا شده اند. ب- موقعیت ماکسیمم های طیفPL عنوان تابعی از دمای اندازه گیری، نمودار گشکل، نشان داده شده است. خط نقطه چین جهت سهولت مقایسه رسم شده است ج- شکل نمادینی در مورد نحوه شکل گیری نمودار گشکل نشان داده شده است.

اکسیتون های آزاد یا بازترکیب های غیر تابشی شرکت کنند. این روند با افزایش دما برای عمیق ترین حالات جایگزیده رخ میدهد. پس از این مرحله، بازترکیب اکسیتون های آزاد غالب می شود، و شاهد افزایش شدت قله مربوط به بازترکیب اکسیتون های آزاد، و جا بجایی آبی این قله با افزایش دما هستیم. بعد از آن شاهد جا بجایی قرمز دیگری هستیم که علت آن کاهش گاف نواری با افزایش دما است . رفتار ۲ شکل مشاهده شده، نشان دهنده وجود حالت های جایگزیده وابسته به نیتروژن در این ماده می باشد،و جابجایی آبی مشاهده شده نشان می دهدکه افزایش دما باعث آزاد شدن حاملهای جایگزیده شده است. با آزاد شدن حاملها، فرایند بازترکیب در این آلیاژ از بازترکیب اکسیتون های جایگزیده به بازترکیب اکسیتون های آزاد تغییر می کند .

الف) روش دیگری برای محاسبه E₀

جهت بررسی وابستگی دمایی گاف نواری نیمرساناهای گاف نواری مستقیم، می توان از مدل آماری بوز-انیشتین<sup>۹۷</sup> یا از معادله تجربی وارشنی استفاده کرد. مدل آماری بوز-انیشتین با رابطه(۴–۳) تعریف می شود [۱۸]:

$$E_{PL}(T) = E_g(0) + \alpha_B / \{1 + 2/[\exp(\Theta_B / T) - 1]\}$$
 (\mathcal{T}-\mathcal{F})

در این رابطه (T) علی تواری و (E<sub>PL</sub>(T) موقیت انرژی قله های PL می باشد.  $\alpha_B$  بیان کننده بیشینه انرژی بر این رابطه (F- (PL) و  $\alpha_B$  میانگین دمایی فونون است. معادله وارشنی نیز با رابطه (F) برهمکنش الکترون – فونون بر حسب (eV)، و  $\Theta_B$  میانگین دمایی فونون است. معادله وارشنی نیز با رابطه (F) برهمکنش می شود [۱۸]:

$$E_g(T) = E_g(0) - \alpha T^2 / (\beta + T)$$
(f-f)

در این رابطه، (eV/K) β پارامتر تجربی مربوط به حالت های جفت شده و(K) β دمای دیبای است. مقدار E<sub>0</sub> را میتوان ازطریق برازش معادله بوز\_\_\_ انیش\_تین یا وارش\_نی با موقعیت انرژی قله های طیف PL در دماهای مختلف (نمودار Sشکل) بدست آورد.

ما با استفاده از این روش ، از طریق برازش مدل آماری بوز\_ انیشتین با نمودار ۵شکل نمونه لایه روآراستی GaN<sub>0.013</sub>As<sub>0.987</sub> مقدار E<sub>0</sub> این نمونه را بدست آوردیم. پارامترهایی که از برازش معادله بوز\_انیشتین بدست آوردیم عبارتند از: ev قرار eV این معادله معاد موار  $\alpha_B = 9$  mev او  $\alpha_B = 1/$  mev از تفاضل مقادیر انرژی منحنی بوز\_ انیشتین و نمودار ۵شکل در دمای پایین مقدار E<sub>0</sub> این نمونه را در حدود mev

76 Bose–Einstein

E<sub>0</sub>=۲۵ بدست آوردیم، که این نتیجه با گزارش های منتشر شده در مورد اندازه E<sub>0</sub> همخوانی دارد[۲۱]. لازم به ذکر است که پدیده Sشکل در آلیاژهای محدوده دوم نیز مشاهده می شود[۲۱].

شکل(۴–۸) برازش مدل آماری بوز\_انیشتین با نمودار Sشکل نمونه لایه روآراستی GaN0.013AS0.987 جهت محاسبه مقدار Eo این نمونه را نشان می دهد.

ب) بررسی رفتار Sشکل در نمونه های رشد داده شده به روش MOVPE

جهت مقایسه اثر رشد بر وابستگی دمایی طیف PL ، گزارش های منتشر شده در مورد رفتار S شکل نمونه هایی که با روش MOVPE رشد داده شده اند را بررسی می نماییم.

در شــکـل (۴–۹) الف ، موقعیـت قلـه هـای PL مربوط بـه نمونـه لایـه روآراســتی «GaN<sub>\*</sub>Ası با PL (نمونه های گروه دومنت<sup>۷۷</sup> [۱۸]) نشان داده شده است . در بازه دمایی ۲(۴۵–۱۰) کاهش قله PL ٪.

<sup>w</sup> H. Dumont

به اندازه ۲۰ ساده است. در بازه دمایی ۲(۹۰-۲۰) افزایش قله PL به اندازه ۲۰ mev مشاهده می شود . مقدار نوعی  $\alpha_B \, \alpha_B \, \Theta_B$  برای نمونه های <sub>۲۰</sub>As<sub>1</sub>x GaN<sub>x</sub>As<sub>1</sub> با ۲۰/۰۰۵ ۳ر محدوده بین/et/۱۵ (۲/۱۰ (۲/۵ مربع) (۲/۱ اگزارش شده است . جالب است بدانیم که هر دو پارامتر با افزایش در صد ۱۸ نمونه افزایش می یابند[۱۸] گزارش شده است . جالب است فله PL نمونه های چاه کوانتومی یگانه GaNAs برای دو نمونه با درصدهای نیتروژن آسله PL نمونه های چاه کوانتومی یگانه GaNAs برای دو نمونه با درصدهای نیتروژن ۲/۵ / ۲/۵ (۲/۵ مربع) به مصورت یکنوانت در تمام محدوده دمایی با افزایش دمای ۲۰



شکل(۴–۹) موقعیت ماکسیمم های طیف PL به عنوان تابعی از دمای اندازه گیری برای نمونه های الف- لایه روآراستی و ب- نمونه های چاه کوانتومی یگانه GaN0.025AS0.975 و ب- نمونه های چاه کوانتومی یگانه GaN0.025AS0.975 و ج-

جدول(۴–۱) پارامترهای معادله وارشنی مربوط به نمونه های چاه کوانتومی یگانهGaNAs با درصدهای متفاوت نیتروژنGaNAs [۱۸].

| درصد نیتروژن(٪ ) | $\beta(K)$ | $\alpha(\frac{eV}{K})$                   |
|------------------|------------|--|
| $\nabla/\Delta$  | ۳۰۰        | $\Delta/\Upsilon \times 1 \cdot {}^{-F}$ |
| ٣/۵              | ۱۲۵        | ۳/۸ ×۱۰ -۴                               |

کاهش می یابد . این رفتار نوعی با معادله وارشنی قابل انطباق می باشد . مقادیر بدست آمده برای lphaو eta از برازش رابطه وارشنی با داده های تجربی این نمونه ها ، در جدول(۴–۱) نشان داده شده است [۱۸].

# ۴-۱-۴ جابجایی آبی خطوط PL با افزایش توان تحریک





شکل(۴-۱۰): الف- طیفهای PL یک نمونه نوعی GaNAs در شدت های تحریک متفاوت[۲۲]. ب- نمودار نمادینی از فرایند پر شدن حالتهای خالی در اثر افزایش شدت تحریک.

شـدت PL در این بخش زیاد می شـود و شـکل نمودار PL به صـورت متقارن تری در می آید [۱۸]. افزایش شـدت تحریک پر می شـود و حامل تحریک شده ترازهای بالاتر را پر می کند. به این ترتیب شاهد جابجایی آبی خطوط طیف PL با افزایش شدت تحریک هستیم. نمودار نمادینی از این فرایند



شکل(۴–۱۱): موقعیت انرژی پیک های PL بر حسب شدت تحریک برای نمونه های: الف) لایه روآراستی و ب) چاههای کوانتومی یگانه [۱۸].

در شکل(۴–۱۰)ب نشان داده شده است. در شکل(۴–۱۱) نیز نموداری از انرژی قله های PL بر حسب شدت تحریک برای نمونه های گروه دومنت[۱۸] رسـم شـده است. شـکل (۴–۱۱)الف، مربوط به لایه روآراستی، افزایش قابل توجهی را در انرژی قله ها در محدوده VP ۲/۱۰ تا VP ۲/۱۰ ، با افزایش شدت تحریک ، نشان مـی دهـد . مـقـدار جـابـجـایـی آبـی بـه انـدازه VP ۱۵ ۲۰ تا ۱۷ ۶ ۱/۲۰ ، با افزایش شدت تحریک ، نشان ( لگاریتمی ) میباشـد. در شـکل (۴–۱۱)ب مقدار جابجایی آبی برای نمونه های چاه کوانتومی یگانه نشـان داده شده است. در نمونه چاه کوانتومی با ٪ ۲/۵–۲۱ مقدار جابجایی آبی برای نمونه های چاه کوانتومی یگانه نشان داده شده است. در نمونه چاه کوانتومی با ٪ ۲/۵–۲۱ مقدار جابجایی آبی استا ۲ مونه های چاه کوانتومی یگانه نشان در مونه شده است. در نمونه چاه کوانتومی با ٪ ۲/۵–۲۱

۲−۱−۴ وابستگی زمانی طیف PL به انرژی نشری

مطالعه زمان واهلش طیف PL برای تابش های نزدیک به لبه گاف نواری راه مناسبی برای بررسی مکانیسم های بازترکیب تابشیی در آلیاژ GaNAs می باشید. در شیکل (۴–۱۲) وابسیتگی طیفی



شکل(۴-۱۲) وابستگی طیفی زمان واهلش PL (نقاط) مربوط نمونه چاه کوانتومی چند گانه GaN0.011AS0.989 مورد مطالعه را نشان می دهد. منحنی خط پر از رابطه (۴-۵) بدست آمده است. جهت مقایسه طیف PL نمونه با نمودار نقطه چین نشان داده شده است.

زمان واهلش PL مربوط به ساختار چاه کوانتومی چند گانه GaAs/هوی/GaAs ، که در دمای ۲۸، اندازه گیری نموده ایم، نشان داده شده است. در این شکل مشاهده می شود که زمان واهلش PL شدیداً تابع انرژی نشر شده می باشد. وابستگی طیفی مشاهده شده در منحنی های زمان واهلش PL شکل(۴–۱۲)، یک مشخصهٔ بازترکیب های تابشی ناشی از اکسیتون های جایگزیده (LE) است و منعکس کننده توزیع انرژی آنها است. همان طور که در این شکل مشخص است، زمان واهلش اکسیتون های جایگزیده(LE) معمولاً با کاهش انرژی PL افزایش می یابد و در بخش کم انرژی دنباله نواری PL اشباع می شود . بازترکیب اکسیتون های که شدیداً جایگزیده اند (یعنی بخش کم انرژی طیف PL) عمدتاً بصورت تابشی است، ولی زمان بازترکیب اکستیون های با جایگزیده اند (یعنی بخش کم انرژی طیف PL) عمدتاً بصورت تابشی است، ولی زمان بازترکیب اکستیون های با جایگزیده اند (یعنی بخش کم انرژی طیف PL) عمدتاً بصورت تابشی است، ولی زمان بازترکیب پدیده، بدین دلیل است که، برای اکستیون های با جایگزیدگی کمتر (نسبتا آزاد وآزاد) احتمال گرفتار شدن در کانال های در رقابت با کانال های تابشی (نظیر مراکز غیر تابشی) وجود دارد. بنابراین احتمال شرکت اکستیون های با جایگزیدگی ضعیف در فرآیندهای غیر تابشی سریع، باعث کاهش زمان واهلش PL در بخش انرژی های بزرگتر طیف PL می شود. انرژی اکسیتون های جایگزیده، به اندازه انرژی جایگزیدگی از انرژی اکسیتون های آزاد کمتر است؛ کوچکتر بودن انرژی این اکسیتون ها سبب می شود که آنها در وضعیت پایدارتری نسبت به اکسیتون های غیر جایگزیده و پر انرژی قرار دشته باشند، پس طول عمر آنها طولانی تر است .

از آنجا که نمودارهای زمان واهلش PL که شکل(۴–۱۲) از آنها استخراج شده است تک نمایی بوده اند و زمان واهلشPL تابع انرژی نشر شده می باشد، وابستگی طیفی زمان واهلش PL را می توان با تابع زیر شرح داد [۱] :

$$\tau(hv) = \frac{\tau_{rad}}{1 + E_0^{-1} \exp(hv - E_m)}$$
(\Delta-\F)

در این رابطه  $\mathcal{T}_{rad}$  طول عمر تابشی، و  $E_m$  سطح انرژیی است که در آن احتمال انتقال اکستیون ها به حالت های جایگزیده عمیق تر با احتمال باز ترکیب تابشی برابر است، و  $E_0$  مقدار انرژی پتانسیل جایگزیدگی است . از برازش رابطه فوق با داده های تجربی برای نمونه های چاه کوانتومی و لایه های روآراستی GaNAs، طول عمر تابشی تقریباً بین ۵ تا ۸ نانو ثانیه به دست آمد،که با طول عمر تابشی ترکیب مادر ۳ ns) GaAs (۳ ns)

با توجه به همخوانی طول عمر تابشی ترکیب GaNAs با طول عمر تابشی ترکیب مادر GaAs و از آنجا که فرایند غالب در فرایندهای بازترکیب تابشی آلیاژ GaAs در دمای پایین، بازترکیب اکسیتونی می باشد، و با توجه به اثبات وجود حالت های جایگزیده در آلیاژهای GaNAs در مباحثی که تا کنون مطرح نمودیم، می توان نتیجه گرفت که، احتمالا فرایند غالب بازترکیب تابشی در آلیاژهای GaNAs در دمای پایین، بازترکیب اکسیتون های جایگزیده می باشد. البته به دلیل مشاهده پدیده Sشکل در طیفهای وابسته به دمای PL، با افزایش دما بازترکیب اکسیتون های آزاد فرایند غالب بازترکیب را برعهده می گیرند.

# ۲-۴ وابستگی دمایی گاف نواری آلیاژ GaNAs

در این بخش تغییرات دمایی گاف نواری آلیاژهای GaNAs و رابطه این تغییرات با غلظت نیتروژن، را مورد بررســی قرار می دهیم. نمونه هایی که در این بخش مورد بررســی قرار می گیرند، نمونه های گروه ناکامورا<sup>۸۷</sup> می باشـند[۲۳]. این نمونه ها، لایه های روآراسـتی GaAs/ <sub>۲۰</sub>مهها و رابطه ایا درصـدهای N متفاوت می باشـند .نمونه های مورد مطالعه، به روش روآراسـتی پرتو مولکولی آلی – فلزی<sup>۹۷</sup> رشد داده شده اند. خواص اپتیکی نمونه های مورد مطالعه با اندازه گیری های جذب در محدودهٔ دمایی X(۲۹۷–۲۵) مورد مطالعه قرار گرفته است.

GaN<sub>0.034</sub>AS<sub>0.966</sub> و GaAs و GaAs و GaAs و ما برای نمونه های GaAs و GaAs و GaAs  $(\alpha E)^2$  ( $\alpha E$ ) و GaAs و GaN<sub>0.008</sub>AS<sub>0.992</sub> و GaAs ، که از طریق اندازه گیری طیف عبوری از آنها در دماهای ۲ ۲۵ و GaAs و Ga

MT.Nakamura

<sup>&</sup>lt;sup>ve</sup> Metalorganic MBE



شکل(۴–۱۳): وابستگی <sup>2</sup> (α*E*) به انرژی فوتون ها درآلیاژهای GaNAs با درصدهای N متفاوت ،که در دمای پایین و دمای اتاق اندازه گیری شده است[۲۳].

<sup>2</sup>(*αE*) تخمین زده می شود. در این شکل کاهش گاف نواری با افزایش درصد N، به وضوح مشاهده می شود. بعلاوه مشاهده می کنیم که در همه نمونه ها، گاف نواری با افزایش دما کاهش یافته است، ولی میزان این کاهش با افزایش درصد N در آلیاژها کمتر شده است. درنمونه GaAs حدودا V ۲۰۱۰ ، و در نمونه های این کاهش با افزایش درصد X در آلیاژها کمتر شده است. درنمونه GaAs حدودا V ۲۰۱۰ ، و در نمونه های GaNAs مدودا ی ۲۰۴۰ ، و در ۲۰/۰۰ و در آلیاژها کمتر شده است.

شکل (۲۹۷ می دوم. (در دماهای ۲ ۵ می ۲۵ (۲۹۷ می دول.) می ۵۲ (در دماهای ۲ ۲ ۲ ۲ (۲۹۷) در آلیاژهای GaNAs با درصدهای متفاوت ۸، را نشان می دهد.همانطور که در این شکل دیده می شود برای درصد های خیلی کم ۸ (نزدیک صفر) تغییرات گاف نواری سریع است. با افزایش درصد نیتروژن (بیش از ٪ ۰/۱) تغییرات  $\Delta E_g$  مستقل از درصد نیتروژن می شود. در این وضعیت تغییر گاف ( $\Delta E_g$  مستقل از درصد نیتروژن می شود. در این وضعیت تغییر گاف ( $\Delta E_g$  مستقل از درصد نیتروژن می شود. در این وضعیت تغییر کاف ( $\Delta E_g$  مستقل از درصد نیتروژن می شود. در این وضعیت تغییر اف ( $\Delta E_g$  مستقل از درصد نیتروژن می شود. در این وضعیت تغییر اف ( $\Delta E_g$  مستقل از درصد نیتروژن می شود. در این وضعیت تغییر اف ( $\Delta E_g$  مستقل از درصد نیتروژن می شود. در این وضعیت تغییر اف ( $\Delta E_g$ ) نمونه ها تقریبا ٪ ۶۰ آلیاژ GaAs است. با توجه به این مشاهدات می توان این نتیجه را در نظر گرفت، که روند جابجا شدن گاف نواری تحت تأثیر دما در آلیاژ GaAs ، با آلیاژهای GaNAs ، به علت وضعیت های مربوط به مای مناوت دارد . در واقع به نظر می رست. که پایداری دمایس دارد . در واقع به نظر می رست. که پایداری دمایس در می در این درمای می مربول به ۸ ، تفاوت دارد . در واقع به نظر می رست. که پایداری دمایس دارد در واقع به نظر می رست. که پایداری دمایس در می در داری در داری در در واقع به نظر می رست. که پایداری دمایس داری در این در می در در در واقع به نظر می رست. که پایداری دمایس در در واقع به نظر می رست. که پایداری دمایس در می در سای



شکل(۲۰–۱۴): تغییرات  $E_s \Delta ( اختلاف گاف نواری در دماهای ۲ ۲۵ و ۲۹ ۲۹ ۲) در آلیاژهای GaNAs با درصدهای متفاوت ۸ [۲۳].$ نیتروژن دار در مقایسـه با نمونه های بدون نیتروژن بهبود می یابد. برای بررسـی چگونگی این وابسـتگی بهدرصد ۸، وابستگی دمایی گاف نواری با جزئیات بیشتر، برای درصد های مختلف نیتروژن تا ٪ ۴ در شکل(۲–۱۵) نشـان داده شـده است . وابسـتگی دمایی گاف نواری نیمرساناهای گاف نواری مستقیم را می توان بهوسیله معادله بوز- انیشتین(رابطه(۴–۳)) یا معادله وارشنی(رابطه(۴–۴)) محاسبه کرد . در این شکل منحنیخط چین، (الف)، از تطبیق داده های GaAs با معادله وارشنی(رابطه(۴–۴)) محاسبه کرد . در این شکل منحنیمربوط به داده های <sub>۲</sub>۱ تطبیق داده های GaAs با معادله وارشنی و بوز— انیشتین در جدول(۴–۲) خلاصه شدهاست . پارامترهای استفاده شده در معادله های وارشنی و بوز- انیشتین در جدول(۴–۲) خلاصه شده است.منحنی هـای (الف) و (ب) در راسـتـای محور انرژی جـابحـا شـده اند ، تا میزان انطباق این دو نمودار بانمودارهای نمونه های دیگرمشـخص شـود. منحنی وابسـتگی دمایی آلیاژهایی که درصـد نیتروژن آنها ٪



شکل(۴–1۵): وابستگی دمایی گاف نواری به دما در نمونه های GaNAs با ٪/۶٪ </></

| ۲]. | ۳] | انيشتين | و بوز- | وارشنى | معادلات | ارامترهای | (۲-۴): پ | جدول |
|-----|----|---------|--------|--------|---------|-----------|----------|------|
|-----|----|---------|--------|--------|---------|-----------|----------|------|

| Sample | N concentration<br>(%) | <i>E</i> <sub>0</sub><br>(eV) | lpha (meV/K) | β<br>(K) | $E_B$ (eV) | $lpha_{B}$ (meV) | Θ <sub>B</sub><br>(K) |
|--------|------------------------|-------------------------------|--------------|----------|------------|------------------|-----------------------|
| (a)    | 0                      | 1.512                         | 0.56         | 146      | 1.545      | 37               | 152                   |
| (b)    | 2.97                   | 1.154                         | 0.61         | 560      | 1.202      | 49               | 285                   |

می شوند، که این پدیده با آنچه در شکل(۴–۱۴) مشاهده می شود ، همخوانی دارد . ولی منحنی وابستگی دمایی آلیاژهایی که درصد نیتروژن آنها بین ٪ x<۰/۱۷> ٪ x/۶۶ می باشد، به طور کامل با یک مدل منطبق نمی شود. وابستگی دمایی این آلیاژها در دماهای پایین با رابطه(۴–۳)، و در دماهای بالا با رابطه(۴–۴) منطبق می شـود. دمای ویژه ای که در آن، رفتار منحنی ها از حالت (الف) به (ب) تغییر می کند با افزایش غلظت N، افزایش می یابد. بنابراین دو نوع وابسـتگی دمایی متفاوت، بسـته به درصـد نیتروژن ، در آلیاژ GaN<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub>

- ۲. در گروه دوم( ٪/۳/۷۶ × × × ۸/۰ )، به علت وجود حالت های جایگزیده مربوط به ۸، وابستگی دمایی  $\Delta E_g \approx 0.00$  والستگی دمایی گاف نواری این آلیاژها در دماهای پایین کوچکتر است .

از مقایسه جا بجایی لبه جذب آلیاژهای GaNAs و GaAs در اثر تغییر دما ، مشاهده می شود که جا بجایی لبه جذب درنمونه های GaNAs در مقایسه با نمونه GaAs، حدود ٪ ۴۰ کاهش یافته است. بنابراین تغییرات دمایی گاف نواری در آلیاژهای GaNAs به صورت قابل ملاحظه ای در مقایسه با GaAs کاهش می یابد، و شدت و ضعف این وابستگی دمایی به درصد نیتروژن در GaNAs بستگی دارد.

# ۴–۳ تاثیرات عملیات RTA روی آلیاژهای حجمی و نانوساختار GaNAs

نتایج مطالعات و آزمایش های اپتیکی روی GaNAs گواه بر این مطلب است که ارتباط تنگاتنگی بین نوسانات پتانسیل و درصد نیتروژن نمونه ها یا خوشه های نیتروژنی وجود دارد. در آلیاژهای نیتروژن دار رقیق GaNAs برای رسیدن به گاف نواری مطلوب و دلخواه، ناگزیر از افزایش درصد نیتروژن هستیم. این کار روی درجه کیفیت اپتیکی نمونه تأثیر محسوسی دارد. از سوی دیگر به علت عدم تجانس بین ترکیبات مادریعنی GaN وGaAs (یکسان نبودن ساختار بلور وتفاوت پارامترهای شبکه) ، برای اطمینان از داخل شدن مقدار بیشتر نیتروژن به ماده، این آلیاژها اغلب تحت شرایط غیر تعادلی(شرایط رشد در دماهای نسبتاً پایین (۴۸۰۲–۴۲۰۰))، رشـد داده میشود. توزیع غیر یکنواخت اتمهای نیتروژن تحت شرایط غیر تعادلی رشد، یکی از دلایل مهم برای ایجاد افت وخیزهای پتانسیل است. با توجه به این فرض، مشخص شده است که افزایش دمای رشـد یا استفاده از عملیات های بعد از فرایند رشد<sup>۸۰</sup> نظیر بازپخت<sup>۸۱</sup> و عملیات حرارتی سریع (RTA) می تواند بخشـی از نوسانات پتانسیل را که به علت توزیع غیر یکنواخت نیتروژن ها ایجاد شده است، بهبود بخشـد. مطالعات میکروسکوپ الکترون عبوری TEM<sup>۸۲</sup>نشان داده است که حضور نیتروژن باعث تغییر تنش عرضی و افت وخیزهای عرض چاه کوانتومی می شود[۱].

مکانیسم دقیق نحوه تاثیر عملیات RTA روی آلیاژهای نیتروژن دار رقیق GaNAs مشخص نشده است، ولی این موضوع، به غیرفعال شدن برخی از کا نال های باز ترکیب غیر تابشی نسبت داده می شود. اتم های N در شبکه بلوری آلیاژهای GaNAs که با روش روآراستی پرتو مولکولی (MBE) رشد داده شده اند، ممکن است در وضعیت های زیر قرار بگیرند[۲۴]:

۱)جانشین شدن اتم های As شبکه با اتم های N ( N<sub>As</sub> )؛

۲) پیوندهای N-As درون شبکه ای؛

۳)پیوندهای N–N درون شبکه ای؛

۴)اتم های ایزوله N داخل شبکه [۲۵،۲۶].

عملیات های بعد از فرایند رشد نظیر عملیات حرارتی سریع به هدف باز گرداندن بیشتر اتمهای درون شبکه ای N به نقاط شبکه (و همچنین کاهش تمرکز اتم های N درون شبکه ای، که ایجاد نقایص غیر

<sup>^.</sup> Post-Growth Treatment

<sup>81</sup> Annealing

<sup>AY</sup> Transmition electron microscopy

بازتابشی می کنند) و بهبود بخشیدن کیفیت اپتیکی ساختارها انجام می شوند. در این زمینه، گزارشی بر مبنای نتایج آزمایش های تحلیل واکنش هسته ای (NRA <sup>۸۳</sup>) ارائه شده است، مبنی بر اینکه اتم های درون شبکه ای N می توانند از طریق بیرون راندن اتم های As از نقاط شبکه، در طول عملیات حرارتی RTA ، جانشین آنها شوند؛ هر چند جزئیات تحقیقات در این زمینه مسکوت مانده است [۲۷].

در این بخش خواص اپتیکی نمونه های نانو ساختار مورد مطالعه GaNAs/GaAs که با روش روآراستی پرتو مولکولی(MBE) رشد داده ایم، و همچنین ساختارهای لایه ای GaNAs/GaAs گروه چو<sup>۹۸</sup> که به روش رسوب سازی با بخار آلی- فلزی(MOCVD) [۲۹] رشد داده شده اند، و تحت عملیات حرارتی سریع قرار گرفته اند را، به منظور تعیین مکانیسم هایی که باعث بهبود کیفیت اپتیکی نمونه ها می شوند، بررسی می نماییم.

# ۲−۴ اثر RTA روی نمونه های رشد داده شده به روشMBE

#### ۲-۳-۴ تأثیر RTA را روی طیفهای LT PL نمونه های مورد مطالعه

ابتدا ، برای روشن شدن اثر دمای رشد روی میزان دررفتگی ها ، نتایج RTA را برای نمونه هایی که در ۴۲۰C و ۵۸۰C به روش روآراستی پرتو مولکولی رشد داده شده اند، بررسی می نماییم. همه نمونه ها دارای لایه ی پوششی GaAs به ضخامت ۱۰ nm می باشند. عملیات RTA بعد از رشد نمونه ها در محیطی حاوی N2 در دمای ۵۵۰C انجام شده است .

شــکل(۴–۱۶) تأثیر RTA را روی کیفیت اپتیکی سـاختارهای مختلف GaN<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub>/GaAs با درصـد نیتروژن ٪x = 1/۲ نشان می دهد . همانطور که در این شکل دیده می شود، بهبود قابل توجه کیفیت اپتیکی GaNAs بعد از عملیات RTA با ۳ تا ۱۰ برابر شـدن شـدت PL همراه شـده اسـت. علاوه بر این، یک کاهش اساسی در پهنای طیفPL در نصف ماکزیمم برای نمونه چاه کوانتومی چند گانه GaN<sub>0.012</sub>As<sub>0.988</sub>/GaAs قبل

<sup>Ar</sup> Nuclear Reaction Analysis.
<sup>AF</sup> S. J Chu
از عصمل (۱۴–۱۷) بی از ۲۵ می از ۲۵ می از ۲۵ می (۲۰–۹۰) بی (۲۹–۱۹) بر (۲۹–۱۹) از ۹۵ می مود. این میزان پهنای طیف ۲۱ در محدوده نمونه های با کیفیت بالای GaNas در حدودVimeV مشاهده می شود. این میزان پهنای طیف ۲۱ در محدوده نمونه های با کیفیت بالای GaNAs است که تاکنون گزارش شده است[۱۶]. بهبود اپتیکی GaNAs بعد از عملیات TTA نشان دهنده غیر فعال شدن مراکز غیر تابشی است. نکته دیگری که در شکل (۴–۱۶) وجود دارد این است که، عملیات RTA باعث جابجایی آبی در موقعیت بیشینه طیف ۹ با در محدوده نمونه های با کیفیت بالای GaNAs است که تاکنون گزارش شده است. از ۲۵]. بهبود اپتیکی GaNAs بعد از عملیات RTA نشان دهنده غیر فعال شدن مراکز غیر تابشی است. نکته دیگری که در شکل (۴–۱۶) وجود دارد این است که، عملیات RTA باعث جابجایی آبی در موقعیت بیشینه طیف ۹ به اندازه ۹۳ تا ۹۳ که شده است. این مطلب ممکن است نشان دهنده افزایش گاف نواری نمونه ها باشد. به منظور معین کردن منشأ جابجایی آبی نشان داده شده در طیف ۹ ما اندازه گیری های PLE انجام گرفته است. نمودارهای نقطه چین در شکل (۴–۱۶) نشان دهنده طیف حاصل از اندازه گیری های ۹ ای است.



شکل(۴–۱۶) : تاثیر RTA روی نمونه های مختلف GaN<sub>0.012</sub>As<sub>0.988</sub>/GaAs . الف) لایه روآراستی GaN<sub>0.012</sub>As<sub>0.988</sub>/GaAs رشد داده شده در دمای پایین ب)چاه کوانتومی چند گانه GaN<sub>0.012</sub>As<sub>0.988</sub>/GaAs رشد داده شده در دمای پایین ج) چاه کوانتومی چند گانه GaN<sub>0.012</sub>As<sub>0.988</sub>/GaAs رشد داده شده در دمای بالا رانشان میدهد. نمودار خط پر نشان دهنده طیفهای PL ونمودار نقطه چین مربوط به طیفهای PL می باشد.طیف مربوط به نمونه های قبل از RTA با منحنی های ساده ، ومنحنی های خط-نقطه مربوط به طیفهای پس

همانطور که در این شکل دیده می شود فقط برای نمونه چاه کوانتومی چندگانه که در دمای۴۲۰C رشد داده شده بود، گاف نواری به مقدار MeV ۲۵ افزایش نشان می دهد، در حالی که جابجایی آبی قله طیف PL ناشی از عملیات RTA بزرگتر از این مقدار (تقریباً ۵۷ ۵۰) است. با توجه به عدم جابجایی طیفهای PLE مربوط به لایه روآراستی GaNAs قبل و بعد از عملیات RTA ، این افزایش به دلیل تغییر در پتانسیل چاه مربوط به لایه روآراستی نمی GaNAs/GaAs قبل و بعد از عملیات RTA ، این افزایش به دلیل تغییر در پتانسیل چاه کوانتومی است ، که احتمالا به علت درهم آمیختگی فصل مشترک ساختار GaNAs/GaAs اتفاق افتاده است[17]. درهم آمیختگی، فقط برای نمونه چاه کوانتومی رشد داده شد در دمای پایین شدید است. بنابراین جابجایی قله PL در گاف نواری است (17]. درهم آمیختگی، فقط برای نمونه چاه کوانتومی رشد داده شد در دمای پایین شدید است. است[18]. درهم آمیختگی، فقط برای نمونه مربوط به تغییرات ناشی از عملیات RTA در گاف نواری است (30). والی می ایز این می این از این می در این نمونه مربوط به تغییرات ناشی از عملیات GaNAs رای در مای پایین شدید است. این از این مالی که مربوط به تغییرات ناشی از عملیات GaNAs رای نواری است (31). درهم آمیختگی فصل مشترک ساختار GaNAs/GaAs اتفاق افتاده است (31). درهم آمیختگی فصل مشترک ساختار GaNAs/GaAs الین شدید است. این این می در این نمونه چاه کوانتومی رشد داده شد در دمای پایین شدید است. این این بایراین جابجایی قله عام مشاهده شده در این نمونه مربوط به تغییرات ناشی از عملیات GaN در گاف نواری بنابراین جابجایی قله عام مشاهده شده در این نمونه مربوط به تغییرات ناشی از عملیات GaN در گاف نواری بنابراین جابجایی قله با توجه به افزایش قابل توجه شدت قله طیف A

طبق بررسی های پیشین، تابش های مربوط به لبه گاف نواری در آلیاژ GaNAs در دماهای پایین ، بوسیله بازترکیب تابشی اکسیتون های جایگزیده (LE) درافت وخیزهای پتانسیل لبه نوار رسانش ایجاد میشود. همه خصوصیات نهادینه طیف PL بعد از عملیات RTA ، از نظر کیفی دقیقاً همانند خصوصیات قبل از عملیات RTA باقی می ماند و این مطلب نشان دهنده ساز و کار های مشابه PL برای نمونه ها، قبل و بعد از عملیات حرارتی سریع است .البته بعد از عملیات RTA، مقدار پتانسیل جایگزیدگی که انعکاس دهنده درجه بی نظمی در آلیاژ ناشی از نوسان در ترکیب آلیاژ و بی نظمی در آلیاژ ناشی از نوسان در ترکیب آلیاژ و تنش های محلی می باشد. اولین برهان تجربی برای این نتیجه گیری، از تجزیه و تحلیل شکل نمودار PL

- توزیع انرژی حالت های جایگزیده در افت و خیزهای پتانسیل ، تعیین کننده شیب دنباله نواری طیف PL میباشد.

- کم شـدن شـدید پهنای نمودار PL بعد از عملیات RTA در شکل (۴–۱۳) می تواند نشانگر کاهش پتانسیل جایگزیدگی باشد . - کاهش آشـکار جابجایی استوک(اختلاف بین قله طیف های PLE و PL) نیز ، برای نتیجه گیری در مورد کاهش پتانسیل جایگزیدگی مؤثر است .

برای بررسی بیشتر ساز و کار بازترکیب تابشی در این آلیاژ می توان از اندازه گیریهای TRPL استفاده کرد. به عنوان نمونه ، برای ساختار چاه کوانتومی چند گانه GaN0.012As0.988/GaAs وابستگی طیفی زمان واهلش PL برای حالتهای قبل وبعد از عملیات حرارتی در شکل(۴–۱۷) نشان داده شده است. نمودارهای TRPL ای که این منحنی ها از آنها استخراج شده اند را، می توان بوسیله یک منحنی تک نمایی با زمان واهلشی که، شدیداً وابسته به انرژی PL است توصیف کرد. همانطور که پیش ازاین نیز اشاره شد وابستگی طیفی مشاهده شده در منحنی های زمان واهلش PL شکل (۴–۱۷)، یک مشخصهٔ بازترکیب های تابشی ناشی از اکسیتون های جایگزیده (LE) است. براساس توصیفی که پیش از این در مورد خصوصیات وابستگی طیفی زمان واهلش PL بیان نمودیم، مشــاهده می شــود که رفتار این نمودارها در حالتهای قبل و بعد از عملیات RTA یکسان است، که نشان دهنده ساز و کار های مشابه PL ، یعنی بازترکیب اکسیتون های قـــبــل \_ون\_ه ه\_ا ;1 نــــمـــ ـزيـــده ، بـــراي ى\_\_\_ 9



شکل(۴–۱۷) الف– وابستگی طیفی زمان واهلش PL در دمای۲کلوین، مربوط به نمونه MQW MQW GaAs/GaN<sub>0.012</sub>As<sub>0.988</sub> RQW درحالتهای قبل(مثلث) وبعد(دایره) از عملیاتRTA را نشان می دهد(خطوط جهت راهنمایی رسم شده است). نمودارهای PL نمونه، قبل از عملیاتRTA با نمودار نقطه چین و بعد از عملیاتRTA با نمودار خط– پر نشان داده شده است. نمونه ها در دمای پایین رشد داده شده اند. ب– فلش ها نشان دهنده افزایش زمان واهلش PL در انرژی های نشری مختلف، بعد از عملیاتRTA می باشند.

عملیات RTA میباشد. از سوی دیگر افزایش قابل توجه طول عمر طیف PL پس از عملیات RTA (شکل(۴-۱۷)ب) در همه انرژی های نشری، نشان می دهد که بعد از عملیات حرارتی مراکز غیر تابشی موجود در نمونه های مورد مطالعه غیر فعال شده و در نتیجه کاهش یافته اند.



شکل(۴–۱۸): وابستگی دمایی زمان واهلش PL در یک انرژی نشری کوچک (مربوط به قسمت کم انرژی طیف PL) مربوط به نمونه چاه کوانتومی چندگانه GaN0.011As0.989 قبل و بعد از عملیات RTA .



شکل(۴–۱۹) وابستگی دمایی زمان واهلش PL در انرژی های نشری متفاوت مربوط به نمونه چاه کوانتومی چندگانه GaN0.012AS0.988 الف- قبل از عملیات RTA و ب- بعد از عملیات RTA را نشان می دهد.

غیر جایگزیده حاصل نشده است. انرژی گرمایی مورد نیاز برای آزادشدن اکسیتون ها از وضعیت های جایگزیده، با میزان انرژی جایگزیدگی تعیین می شود. در نمونه ای که تحت عملیاتRTA قرار گرفته است ، کاهش بزرگی در زمان واهلش PL در همهٔ انرژی ها، زیر دمای۲<sup>۵</sup> ۶۰ رخ می دهد.کاهش زمان واهلش PL در این محدوده دمایی نشان دهنده کاهش انرژی فعال سازی اکسیتون ها از وضعیت های جایگزیده است. افزایش وابستگی دمایی زمان واهلش PL در نمونه بعد از عملیات RTA، گواه دیگری است که نشان دهنده کاهش انرژی جایگزیدگی در آلیاژ GaNAs در اثر عملیات RTA می باشد. بدین ترتیب بر اساس نتایج آزمایشات PLE ، PL و TRPL انجام شده نتیجه می گیریم که عملیات RTA افت و خیزهای پتانسیل لبه گاف نواری GaNAs[17] را به طرز قابل توجهی تحت تأثیر قرار داده وباعث کاهش آن می شود و خواص اپتیکی آلیاژ را بهبود می بخشد.

# RT PL تأثیر RTA را روی طیفهای RT PL

تاکنون تأثیر RTA را روی طیفهای PL اندازه گیری شده در دمای پایین مطالعه کرده ایم. اکنون قصد داریم نمودارهای PL بدست آمده در دمای اتاق، برای دماهای RTA متفاوت را بررسی نماییم . البته با توجه به این نکتـه، که طیف LL در دمای اتاق، از بازترکیب حاملهای آزاد ایجاد می شـود . نمونه هایی که در این بخش مورد بررسی قرار می گیرند، نمونه های گروه وانگ <sup>۸۸</sup> می باشند[۲۸]. این نمونه ها دارای لایه پوششی GaAs به ضـخامت ۲۰nm می باشـند. در صد نیتروژن لایه ها ٪ا=x میباشد، و دمای رشد آنها ۲۰۰C بوده است . عملیات حرارت دهی RTA در بازهٔ دماییC( - ۹۰۰۹ ) برای مدت ۴ دقیقه در محیطی حاوی گاز Nz انجام شـد. در طول عملیات RTA به منظور خروج حداقل آرسـنیک از نمونه ها، نمونه ها بوسـیله یک ویفر GaAs پوشانیده شده اند.

شـــکـل(۴–۲۰)الف طیفهای PL اندازه گیری شــده در دمای اتاق، مربوط به لایه های رونشــانی GaN<sub>0.01</sub>As<sub>0.99</sub> ، قبل و بعد از عملیات حرارتی، تحت دماهای متفاوتRTA، را نشــان می دهد؛ و شــکل (۴– ۲۰)ب نشان دهنده تغییرات شدت و انرژی پیک PL برای همان نمونه ها می باشد . ابتدا شدت PL با افزایش دمای عملیات RTA افزایش می یابد، و سـپس کاهش می یابد. دمای بهینه حرارت دهی ۸۵۰C است . دراین دمـا شـــدت طــیف PL بـیشــینـه مـی شـود. هـمانـطـور کـه در شکل (۴–۲۰)ب مشاهده می شود، افزایش دمای حرارت دهی از ۵۵۰۲ تا ۸۵۰۲ به افزایشی در انرژی قله PL از ۱/۲۴۳e۷ بـه ۱/۲۵۷۷ منجر میشـود، و افزایش قـابـل ملاحظه ای نیز در شـدت PL رخ می دهد. احتمالا،این پدیده به توزیع دوباره نیتروژنها در محدوده گاف نواری (با ثابت ماندن میانگین غلظت نیتروژن) یا خروج مقداری از اتمهای نیتروژن از نمونه در اثر عملیات حرارتی و غیر فعال شـدن مراکز غیر تابشـی مربوط میشـود. با توجه به موقعیت انرژی قله های PL نمونه ای که تحت عملیات حرارتی قرار نگرفته اسـت (قله ۷)، این قله ها احتمالاً از افت و خیزهای پتانسـیل وابسته به خوشه های نیتروژنی سرچشمه گرفته اسـت مشـاهده شده، می باشد. زمانی که دمای حرارت دهی از ۲۰ مونه می شـود؛ و این پدیده علت جابجایی آبی مشـاهده شده، می باشد. زمانی که دمای حرارت دهی از ۲۰ مینتر شود، قله انرژی IP از ۷۹ ۱/۲۵۷ به درارت دهی باعث یکنواخت شـدن توزیع نیتروژن در هر نمونه می شـود؛ و این پدیده علت جابجایی آبی مشـاهده شده، می باشد. زمانی که دمای حرارت دهی از ۲۰<sup>0</sup> بیشتر شود، قله انرژی IP از ۷۹ ۱/۲۸۷ به دماهای بیشتر از دمای بهینه، باعث وارد شدن آسیب هایی به شبکه میشود و به همین دلیل کیفیت اپتیکی لایه را کاهش می دهد [۲۸] .



شکل(۴–۲۰): الف- تاثیر عملیات حرارتی با دماهای متفاوت، روی طیف PL (دردمای اتاق) لایه روآراستی GaN0.01As0.99. ب- تغییرات شدت و انرژی قله PL برای همان نمونه ها [۲۸].

## FTA اثر RTA روی نمونه های GaNAs رشد داده شده به روش MOCVD

در این بخش تأثیر RTA را روی نمونه های GaNAs با درصدهای مختلف نیتروژن، که به روشMOCVD رشد داده شده اند بررسی می کنیم . نمونه هایی که در این بخش مورد بررسی قرار می گیرند، نمونه های گروه چو می باشند. [۲۹]. این نمونه ها، لایه های روآراستی RGaN،AS1 با ٪ ۲/۲ >×> ٪ ۲/۲ می باشند . قبل از عملیات RTA ، هر نمونه به چند قطعه تقسیم شده و سطح برخی از این قطعات با لایه ای به ضخامت RTA ، از SiO2 پوشانده شده است. نمونه ها پس از عملیات رشد، در دماهایی ۲۵ ۶۲۶ تا ۲۵ ۷۷۷ به مدت ۶۰۶ در محیطی حاوی گاز نیتروژن تحت عملیات حرارتی سریع قرار گرفته اند . روی هر نمونه لایه ای از GaAs برای اطمینان از عدم خروج AS قرارداده شد. بعد از عملیات حرارتی سریع لایه پوششی SiO2 با روش های شیمیایی با کمک محلول فلوراید هیدروژن (HF) برداشته شده است. پس از آن نمونه های حرارت دهی شده، بوسیله اندازه گیری های XRD بررسی شده اند، تا اطمینان حاصل شود که تغییر قابل توجهی در درصد ۸ نمونه ها بعد از RTA رخ نداده باشد . در این بخش بحث اصلی ما روی طیفهای L

شـکل(۴–۲۱) طیف PL مربوط به نمونه S1 بدون لایه پوشـشی SiO<sub>2</sub> را قبل و بعد از عملیات RTA نشـان می دهد. در طیف PL نمونه ای که تحت عملیات RTA قرار نگرفته اسـت دو قله دیده می شـود، که موقعیت انرژی آنها در P1 = ۱/۳۴ eV و P2= ۱/۱۶ev قرار دارد. قله P1 مربوط به گاف نواری لایه روآراسـتی GaNAs می باشـد و با پیش بینی حاصل از مدل BAC به خوبی در تطابق است[۳۰]. قله P2 ناشی از تله های موجود در لایه روآراستی GaNAs می باشد. دو احتمال برای منشاء این تله ها پیش بینی می شود: ۱) نقایص نقطه ای ناشی از تهی جای های Ga و ۲) نقایص ناشی از شکافته شدنN-N درون شبکه ای. نقایص مربوط به تهی جای های Ga از نقایص رایج در



شکل(۴–۲۱): طیف PL لایه روآراستی GaN0.007As0.993 (نمونه S1) بدون لایه پوششی SiO2 قبل وبعد از عملیات RTA. نمونه ها در دماهای ۶۲۵ و ۶۷۵ و ۷۲۵ ر ۵۷۷درجه سلسیوس ، تحت عملیات RTA قرار گرفته اند[۲۹] .

نمونه های رشد داده شده به روش MOCVD هستند و تعداد دررفتگی های مربوط به تهی جای های

Ga با افزایش درصـد N نمونه ها افزایش می یابد [۳۱]. نقایص ناشی از N-N های درون شبکه ای باعث ایجاد ترازهای انرژی داخل گاف نواری GaNAs می شـوند [۳۲]. ATA می تواند هر دو نوع نقیصـه را کاهش دهد. افزایش دمای حرارت دهی باعث کاهش مراکز بازترکیب غیر تابشـی، و در نتیجه افزایش شدت قله P1 می گردد. ولی مشـاهده می شود که حرارت دهی در دماهای بیشتر از <sup>©</sup> ۲۰۵۷، باعث کاهش شدت قله P1 می گردد. این کاهش ممکن است به دلیل تغییر ساختمان سطح نمونه یا پخش شدن نقایص در لایه باشد [۳۳]. از سـوی دیگر شـدت قله P2 نمونه حرارت داده شده در مقایسه با شدت قله P2 نمونه ای که تحت عملیات مردد. این کاهش ممکن است به دلیل تغییر ساختمان سطح نمونه یا پخش شدن نقایص در لایه باشد [۳۳]. نمودار PL بعد از عملیات RTA در شکل(۲–۲۱) نیز نشان دهنده بهبود کیفیت اپتیکی نمونه ها پس از عملیات RTA می باشد. خلاصه ای از موقعیت قله های PL نمونه SL بر حسب انرژی و شدت در شکل(۲–۲۲) نشان داده شده است. در همهٔ نمونه هایی که تحت عملیات RTA قرار گرفته اند، یک جابجایی قرمز قله PL طیف PL نسبت به نمونه قبل از عملیات RTA مشاهده می شود. جابجایی قله PL طیف PL نمونه حرارت دهی شده در ۵° ۶۷۵ بدون لایهٔ پوششی sio ، به RTA مشاهده می رسد. این جابجایی (و احتمالا کاهش گاف نواری)، شده در ۵° ۶۷۵ بدون لایهٔ پوششی sio ، به Nev می رسد. این جابجایی (و احتمالا کاهش گاف نواری)، به پرش کوتاه اتم های N از مکان های بین شبکه ای به نقاط شبکه نسبت داده می شود [۲۹]. دراثر حرارت دهی با دمای بالا، به دلیل خروج اتم های نیتروژن از آلیاژ GaNAS، جابجایی قله انرژی PL کاهش می یابد. شدت قله P1 تا دمای ۵° ۲۲۷ به صورت یکنواختی افزایش می یابد؛ و دراین دما شدت قله PL بیشینه می شود. این دما، دمای بهینه حرارت دهی نمونه IS است. بیشینه شدت در مقایسه با نمونه بدون حرارت دهی، ۲۰ برابر افزایش یافته است. عملیات RTA روی سه نمونه دیگر با درصدهای مختلف نیتروژن انجام شده است.

در شـکل(۴–۲۳) دمای بهینه حرارت دهی برحسـب درصـد N نمونه ها، نشـان داده شـده اسـت. همـانطور که در این شــکل دیده می شــود، دمای بهینه حرارت دهی با افزایش درصــد نیتروژن GaNAs



شکل(۴-۲۲): موقعیت قله های طیف PL نمونه S1 بر حسب انرژی و شدت [۲۹] .



شکل(۴-۲۳): دمای بهینه حرارت دهی برحسب درصد نیتروژن [۲۹].

کاهش می یابد. این پدیده را می توان به این ترتیب توضیح داد که، چگالی نقایص در لایه رونشانی GaNAs با افزایش درصد N افزایش می یابد. با انجام عملیات RTA دو فرایند ممکن است درآلیاژ رخ دهد: ۱) فرآیند بهبود بخشی از نقایص ۲) فرآیند ایجاد نقایص جدید. اگر یک دمای حرارت دهی یکسان را در عملیات RTA برای هر ۳ نمونه درنظر بگیریم؛ چون چگالی نقایص درنمونه ها، بادرصـد ۱۸ ارتباط دارد؛ بنابراین در نمونهٔ با درصـد ۸ بیشـتر، بهبود بیشتری مشاهده می شود. هرچند که شکل گرفتن نقایص تحت تأثیر عملیات RTA هم وابسته به درصد ۱۸ نمونه ها است[۳۴]. با افزایش درصد ۸ بی نظمی در نمونه ها (نسبت به نمونه های با درصـد ۸ پایین تر) افزایش می یابد. افزایش دما نیز، در دماهای بیشـتر از دمای بهینه، باعث افزایش بی نظمی می شود. بنا براین چون سیستم دارای درصد نیتروژن بالاتر، بی نظمی ذاتی بیشتری دارد، باید دمای بهینه حرارت دهی آن پایین تر باشـد. در نتیجه، بنا بر مشـاهدات و دلایل ذکر شـده، لایه های روآراسـتی GaNAs با درصـد ۸ بالاتر، دمای بهینه حرارت دهی پایین تری دارند. این مطلب در مورد نمونه های رشـد داده شده به روش MBE [۳۴] هم مشاهده شده است.

برای مطالعه اثر لایهٔ پوشـشی SiO₂، نمونه لایه روآراستی GaN0.013AS0.987 (نمونه S2) را مورد بررسی قرار می دهیم. در طیف PL نمونه بدون عملیات حرارت دهی قله P1 مشاهده نمیشود.



شکل(۴–۲۴) : طیف PL لایه روآراستی GaN0.013AS0.987 (نمونه S2) الف) بدون ،ب) با لایه پوششی SiO2 که در دماهایC° ۶۲۵ ، ۶۷۵ ، ۷۲۵ و ۷۲۵ تحت عملیات RTA قرارگرفته است [۲۹].

شکل(۴–۲۴)الف نمودار PL نمونهٔ حرارت دهی شده بدون لایه SiO<sub>2</sub> را نشان میدهد. دراین شکل بهبود شدت قله P1 و کاهش شـدت قله P2، مشـاهده می شـود. با پوشـاندن نمونه GaNAs به وسیله لایهٔ پوششی SiO<sub>2</sub>، افزایش بیشتری در شدت قله P1 مشاهده می شود، در حالی که شدت قله P2 کاهش می یابد(شکل(۴-۲۴) ب). قبل از عملیات RTA قله P1 در این نمونه به سختی قابل مشاهده است. شدت این قله در اثر افزایش مراکز بازترکیب غیر تابشی بسیار ضعیف است. ولی بعد از عملیات RTA، شدت این قله به نحو چشمگیری افزایش می یابد. در این نمونه نیز مشابه نمونهS1 کم شدن پهنای نمودار PL بعد از عملیات RTA مشاهده می شود، و میزان این کاهش در نمونهٔ دارای لایهٔ پوششی SiO<sub>2</sub> بیشتر است. شدت قله P2 در نمونهٔ S2 دارای لایهٔ پوششی SiO<sub>2</sub> در مقایسه با نمونهٔ بدون لایهٔ پوششی SiO<sub>2</sub>، به میزان ۱۰۰ برابر نسبت به قبل ازعملیات RTA، و به میزان ۱۰ برابر نسبت به بعد ازعملیات RTA، کاهش یافته است.

از آنچه گفته شد می توان نتیجه گرفت که اثر عملیات RTA روی نمونه های دارای لایه پوششی SiO<sub>2</sub> ، چشمگیرتر است. زیرا لایه پوششی SiO<sub>2</sub> در پخش نقایص همکاری می کند[۳۴]، و بدین ترتیب از بین رفتن تله ها با سرعت بیشتری انجام می شود. این ساز و کار شدت قله P1 طیف PL را بهبود می بخشد و باعث ایجادکاهش بیشتر، در شدت قله P2 می شود. لایهٔ پوششی SiO<sub>2</sub> می تواند فرآیند جابجا شدن اتم های N از فضاهای بین شبکه ای به نقاط شبکه را، تسهیل کند. در دمای ۷۵<sup>0</sup><sup>0</sup> ، شدت قله های P2 همهٔ نمونه ها کاهش خوبی پیدا کرده است؛ که این مطلب نشان دهنده از بین رفتن نقایص نقطه ای ایجاد شده در فرآیند رشد پس از عملیات RTA است[۳۵]. بنابراین مشاهده می شود که عملیات RTA باعث بهبود شدت قله P1 و کاهش شدت قله P1 می گردد و همچنین لایه پوششی SiO<sub>2</sub> باعث افزایش قابل ملاحظه ای در شدت قله P1 در طیف P1 نمونه هایی که تحت عملیات RTA قرار گرفته اند، می گردد .

در مجموع از مقایسه خواص اپتیکی نمونه های مختلف GaNAs/GaAs که با روش های MBE و MOCVD رشد داده شده اند و تحت عملیات حرارتی سریع قرار گرفته اند، نتایج ذیل حاصل میشود:

- ۹۰ عملیات RTA با توجه به مشاهدات زیر سبب کاهش پتانسیل جایگزیدگی در همه نمونه های مختلف GaNAs/GaAs می گردد.
  - کاهش شیب دنباله نواری طیف PL پس از عملیات RTA

- کم شدن پهنای نمودار PL بعد از عملیات RTA

- افزایش وابستگی دمایی زمان واهلش طیف PL پس از عملیات RTA

– افزایش شــدت شــدت قله P1 طیف PL کاهش چشــمگیر شــدت قله P2 در نمونه هاییGaAs که با روش MOCVD رشد داده شده اند.

- ۲. افزایش قابل توجه طول عمر طیف PL پس از عملیات RTA نشان دهنده غیر فعال شدن مراکز غیر تابشی موجود در نمونه های مورد مطالعه و در نتیجه کاهش آنها بعد از عملیات RTA می باشد.
- ۳. عملیات RTA از طریق کاهش پتانسیل جایگزیدگی و غیر فعال کردن مراکز غیر تابشی سبب افزایش شدت قله طیف PL به میزان ۳ تا ۱۰ برابر در همه نمونه های مختلف GaNAs/GaAs می شود. با توجه به مباحثی که ذکر شد، مراکز غیر تابشی که به احتمال زیاد پس از انجام عملیاتRTA حذف و غیر فعال می شوند، نقایص نقطه ای هستند.
- ۴. قبل و بعد از عملیات RTA ساز و کار های PL مشابهی در نمونه ها حاکم است و بازتر کیب اکسیتون هایی جایگزیده منشاء طیف PL دمای پایین آلیاژهای GaNAs می باشد.
  - ۵. افزایش دمای رشد سبب بهبود کیفیت اپتیکی نمونه ها می گردد.
  - ۶. لایه های روآراستی GaNAs با درصد N بالاتر، دمای بهینه حرارت دهی پایین تری دارند.
- ۲. اثر عملیات RTA روی نمونه های دارای لایه پوششی SiO<sub>2</sub> نسبت به نمونه های دارای لایه پوششی GaAs، چشمگیر تر است. لایه پوششی SiO<sub>2</sub> در پخش نقایص همکاری می کند، و میزان کاهش نقایص در نمونه های دارای این لایه پوششی بیشتر است.
- ۸. عملیات RTA در نمونه های مختلف GaNAs/GaAs که با روش MBE رشد داده شده اند سبب
   ۸. عملیات ابی در موقعیت بیشینه طیف PL (تا رسیدن به دمای بهینه حرارت دهی ) می گردد. در

حالی که در نمونه هایی که با روش MOCVD رشد داده شده اند شاهدجابجایی قرمزدر موقعیت بیشینه طیف PL (تا رسیدن به دمای بهینه حرارت دهی ) در همه نمونه ها هستیم.

# ۴-۴ بررســی مــدل برهمکنش دافعــه نواری در آلیـاژهای GaNAs وتاثیر RTA روی پارامترهای این مدل

همانطور که قبلا اشاره کردیم حضور یک ناخالصی هم الکترونی در نیمرساناها باعث ایجاد حالتهای شدیداً جایگزیده می شود. انرژی این وضعیت های جایگزیده به الکترونگاتیویته اتم ناخالصی ای که جایگزین عناصر شبکه بلور میزبان می شود بستگی دارد. درسیستم GaAs ، بر همکنش بین تراز جایگزیده N و وضعیت های گسترش یافته نوار رسانش میزبان GaAs، ساختار الکترونیکی نوار رسانش میزبان را تغییر داده و منجر به ایجاد  $_{x-x}$ GaN<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub> قریر الکترونیکی آلیاژهای  $_{x-x}$ GaN<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub> مجموع سه بین وضعیت های جایگزیده (L) و توسعه یافته (k) شرح داد. هامیلتونین کلی این سیستم مجموع سه جمله است[۳7]:

$$H = \sum_{k} E_{k}^{C} C_{k}^{+} C_{k} + \sum_{j} E_{j}^{L} d_{j}^{+} d_{j} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j,k} (e^{ik \cdot j} V_{kj} c_{k}^{+} d_{j} + h.c) \qquad (9-4)$$

که جمله اول هامیلتونین الکترونها در وضعیت های نواری با پراکندگی انرژی E<sub>k</sub><sup>c</sup> و جمله دوم انرژی کل الکترونهای جایگزیده در نقاط ناخالصی شبکه می باشد. جمله سوم تغییر انرژی یک تک الکترون به علت آمیختگی بین وضعیت های نواری و وضعیت های جایگزیده می باشد. فرضی که برای حل این مسئله در نظر گرفته می شود این است که، فقط یک نوار و یک تراز ناخالصی در برهم کنش شرکت می کنند. با محاسبه اختلال ایجاد شده  $\langle k | H_1 | L \rangle$ ، که  $H_1$  انرژی یک تک الکترون است، ماتریس اختلال به صورت زیر به دست می آید[۳۶]:

$$\begin{vmatrix} E_k^c - E(k) & V \\ V & E^L + i\Gamma_L - E(k) \end{vmatrix} = 0$$
 (Y-F)

که <sup>م</sup> E و <sup>H</sup> به ترتیب انرژی نوار رسانش غیر مختل شده میزبان و انرژی تراز جایگزیده مربوط به N نسبت به قله نوار ظرفیت می باشـند[۳۷].  $\langle X||L\rangle = V$  عناصر ماتریس جفت شدگی بین وضعیت های جایگزیده N و وضـعیت های توسـعه یافته نوار رسـانش میزبان می باشـند.V به صـورت  $\overline{X} \sqrt{x}$  نیز نشـان داده می شـود که  $M_{N}$ پارامتر ثابت ماتریس جفت شدگی بین وضعیت های جایگزیده N و وضعیت های توسعه یافته نوار رسـانش و x درصـد N آلیاژ است[۳۸]. در رابطه (۲–۷)  $\Gamma_L$  پهن شدگی رابطه پاشندگی <sup>H</sup> را شرح می دهد. اگر در بحث محاسبات تئوری مدل دافعه نواری عامل پهن شدگی نوار رسانش را صغر بگیریم ، 0 . جوابهای معادله ویژه مقداری (۴–۷) بدست می آید. جوابهای این معادله ترازهای <sup>+</sup> ( بالایی ) و . E ( پایینی ) مدل دافعه نواری هسـتند که در اثر شـکافته شدن نوار رسانش به این ۲ زیرنوار، ایجاد شده اند. انرژی این

$$E_{\pm}(k) = \frac{1}{2} \left\{ (E_k^c + E_L) \pm \sqrt{(E_k^c - E_L)^2 + 4V^2} \right\}$$
 (A-4)

شـکل(۴–۲۵) الگویی از سـاختارهای نواری که به وسیله مدل BAC محاسبه شده است را نشان می دهد. در این شـکل خطوط نقطه چین وضـعیت ترازها را پیش از وقوع دافعه نواری نشـان میدهند، به طوری که EM معرف لبه نوار رسـانش میزبان و EN تراز جایگزیده وابسـته به ناخالصـی همالکترون در نیمرسـانا اسـت. بر همکنش بین حالتهای جایگزیده هم الکترونی و وضـعیت های توسـعه یافته نوار رسـانش تاثیر مهمی روی پاشـندگی دو زیر نوار رسـانش ـE و +E می گذارد. اثر این بر هم کنش روی وضـعیت هایی که به تراز RI نزدیکترند شـدیدتر اسـت. اگر مطابق شـکل(۴–۲۵)الف تراز وضـعیتهای جایگزیده II در میان وضعیت های  $E_M$  توسعه یافته نوار رسانش میزبان،  $E_M$ ، قرار بگیرد، رفتار وضعیت های لبه ی زیر نوار  $E_A$  مشابه ویژگیهای  $E_M$  توسعه یافته ( شکل سهمی وار ) خواهد بود، و مشخصه لبه  $E_A$  بیشتر شبیه تراز  $R_A$  خواهد بود. اگر حالت های جایگزیده زیر لبه نوار رسانش قرار بگیرند(شکل(۴–۲۵)ب)، رفتار لبه ی زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت قبل می شود. زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مای حایگزیده زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مای حایگزیده زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مای حایگزیده زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت می شود. زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مای حایگزیده زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مای می شود. زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مای می شود. زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مای می شود. زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مای می شود. زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مای می شود. زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مول می شود. زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مای می شود. زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مای می شود. زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مای می شود. زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  برعکس حالت مای می شود. زیر نوار  $E_A$  و  $E_A$  و

شکافتگی نواررسانش به دو زیر تراز <sub>۲</sub>۰ و E<sub>۰</sub> و L در آزمایش های طیف سنجی فوتورفلکتانس<sup>۸۰</sup> به وضوح مشاهده شـده اسـت [۴۰٬۳۹٬۳۶]. نتایج این آزمایش ها نشـان داده اسـت کـه با حضـور N در



شکل(۴–۲۵): الگویی از ساختارهای نواری که به وسیله مدل BAC محاسبه شده است: الف- حالتی که تراز وضعیتهای جایگزیده N میان وضعیت های توسعه یافته نوار رسانش میزبان EM ، قرار بگیرد. ب- حالت های جایگزیده زیر لبه نوار رسانش قرار بگیرند[۳۹]. ج-نوار رسانش ترکیب GaAs0.995N0.005 که بر اساس معادله (۴–۸) بازسازی

شده است [۳۶].

<sup>86</sup> Photomodulated reflectance spectra



شکل(۴-۲۶): طیفهای فوتورفکتانس آلیاژهای «GaN<sub>x</sub>Ası با ۲٪ × × × ۰. در  $E_0$  ، قله  $E_0$  مربوط به گذار از قله نوار ظرفیت به انتهای نوار رسانش، و قله  $E_0 + \Delta_0$  نشان دهنده گذار بین انتهای نوار رسانش و تراز حاصل از شکافتگی اسپیس مدار در نوار ظرفیت آلیاژ GaAs می باشد. با حضور  $N_0 + \Delta_0$  و  $E_0 + \Delta_0$  جای خود را به ترتیب به  $E_-$  و  $E_0 + \Delta_0$  می دهند. گذارهای  $E_-$  و  $E_+$  دو زیر نوار GaAs می باشد. با حضور  $N_0$ ،  $Bac - \Delta_0$  و  $E_+$  حای خود را به ترتیب به  $E_-$  و  $E_0 + \Delta_0$  می دهند. گذارهای  $E_-$  و  $E_+$  دو زیر نوار مورد بحث در مدل BAC می باشند که در اثر شکافتگی نوار رسانش ایجاد شده اند. با افزایش درصد N دان می تراز مشاهده می شود ( $R_0 + \Delta_0$  می دهند. گذارهای  $R_0 + \Delta_0$  می دهند. گذارهای  $R_0 + \Delta_0$  می دهند می دود ( $R_0 + \Delta_0$  می دهند. گذارهای  $R_0 + \Delta_0$  می دهند. گذارهای  $R_0 + \Delta_0$  می دهند ( $R_0 + \Delta_0$  می دهند. گذارهای  $R_0 + \Delta_0$  می دهند. گذارهای  $R_0 + \Delta_0$  می دهند ( $R_0 + \Delta_0$  می دهند. گذارهای  $R_0 + \Delta_0$  می دهند. گذارهای  $R_0 + \Delta_0$  می دود ( $R_0 + \Delta_0$  می دهند. آل می داند. با در ( $R_0 + \Delta_0$  می دهند ( $R_0 + \Delta_0$  می دهند. گذارهای  $R_0 + \Delta_0$  می دهند ( $R_0 + \Delta_0$  می دهند ( $R_0 + \Delta_0$  می دهند) ( $R_0 + \Delta_0$  می دهند ( $R_0 + \Delta_0$  می دهند ( $R_0 + \Delta_0$  می دهند) ( $R_0 + \Delta_0$  می در ( $R_0 + \Delta_0$  می

$$E_{g} = E_{-} = \frac{1}{2} \left[ E_{N} + E_{M} - \sqrt{\left(E_{N} - E_{M}\right)^{2} + 4C_{MN}^{2}} x \right]$$
 (A-4)

در شــکـل(۴–۲۷) نتـایج گزارش های گوناگون در مورد تغییرات گاف نواری آلیاژهای ۲۰۰۰ ها با افزایش درصد N نشان داده شده است. منحنی ای که در شکل ملاحظه می فرمائید از تطبیق این داده ها با مدل برهمکنش دافعه نواری(رابطه(۴–۸)) به دسـت آمده است. از برازش مدل برهمکنش دافعه نواری با این داده ها مناسب ترین مقدار برای پارامتر ۷، eV ۲/۷ eV بدست آمده است.



شکل(۴-۲۷): نتایج گزارش های گوناگون[۴۳-۴۶] در مورد تغییرات گاف نواری آلیاژهای «GaN«Ası-x با افزایش درصد N نشان داده شده است . منحنی ای که در شکل ملاحظه می فرمائید از از تطبیق این داده ها با مدل برهمکنش دافعه نواری(رابطه(۴–۸)) به دست آمده است[۳۶].

در این مرحله قصد داریم ابتدا تحول دمایی گاف نواری آلیاژ GaN0.013AS0.987را با استفاده از مدل برهمکنش دافعه نواری بررسی نمائیم و پارامترهای برازش مربوط به این ترکیب را به دست آوریم، سپس اثر عملیات RTA را روی پارامترهای مدل برهمکنش دافعه نواری ترکیب آلیاژ GaN0.011AS0.989 بررسی نماییم. به این منظور روشی را که بر مبنای تحول دمایی گاف نواری پایه نهاده شده است به کار می بریم[۴۲–۴۱]:

$$E_{g} = \frac{1}{2} \left[ E_{N} + E_{M} \left( T \right) - \sqrt{\left( E_{N} - E_{M} \left( T \right) \right)^{2} + 4C_{MN}^{2} x} \right]$$
(9-4)

در این رابط ه برای بیان تغییرات انرژی تراز نیتروژن های جایگزیده EN و وضعیت های توسعه یافته نوار رسانش میزبان (GaAs) EM در اثر حضور نیتروژن از روابط زیر استفاده نمودیم[۴۰] :

$$E_N(x) = 1.675 - 2.52 \ x \tag{1.--}$$

$$E_M(x) = E_g^0 - 1.55 \ x \tag{11-f}$$

در رابطه های بالا x درصد نیتروژن و  $E_g^0$  انرژی گاف نواری آلیاژ میزبان (GaAs) می باشد. وابستگی دمایی گاف نواری آلیاژ میزبان (T) از طریق معادله بوز – انیشتین (رابطه(۴–۳)) محاسبه نمودیم، و پارامترهای پیش فرض مورد نیاز برای این معادله  $\alpha_B$  ,  $\Theta_B$  ,  $\Theta_B$  ,  $\Theta_B$  ,  $\alpha_B$  ) محاسبه نمودیم .  $E_M(T) = E_M(x) + \alpha_R / \{1 + 2/[\exp(\Theta_R/T) - 1]\}$ 

شـکل(۴–۲۸) نتیجه برازش داده های مربوط به نمونه لایه روآراستی GaN<sub>0.013</sub>As<sub>0.987</sub> با معادله مدل برهـمـکـنـش دافـعـه نـواری را نـمـایـش مـی دهـد. در ایـن بـرازش مـقـادیـر  $C_{MN} = 7/F4$  و دیم دهـد. در ایـن برازش مـقـادیـر  $E_N = 1/۶۶۸$  eV دسـت آوردیم، و پارامترهای معادله بوز— انیشــتین که از این برازش بدســت آوردیم  $\alpha_B = 40$  meV و  $\alpha_B = 40$  meV شده است دارد. نتایج بدست آمده از محاسبات ما، در جدول(۴–۳) نشان داده شده است. داده های گروه لی<sup>۸۸</sup> [۴۰]، نیز به عنوان شاهد در این جدول نشان داده شده است.

جدول(۴–۳): نتایج محاسبات پارامترهای برازش داده های مربوط به نمونه های GaN<sub>\*</sub>AS<sub>1-x</sub> با درصدهای Nمتفاوت با معادله مدل برهمکنش دافعه نواری.<sup>۸۸</sup>

| درصد نیتروژن در<br>ترکیب <sub>x-I</sub> GaN <sub>x</sub> As      | عملیات پس از رشد | C <sub>MN</sub> | E <sub>N</sub> (eV) | E <sub>M</sub> (eV) |
|--|------------------|-----------------|---------------------|---------------------|
| $\mathbf{x}_{\mathbf{N}} = \mathbf{V} / \mathbf{V} / \mathbf{V}$ |                  | ۲/۳۶            | 1/87eV              | ۱/۵۶eV              |
|  | عمليات RTA       | ۲/۲۲            | \/YAeV              | $1/\Delta PeV$      |
| x <sub>N</sub> = <b>Y</b> '/.*                                   |                  | ۲/۴۸            | 1/8TeV              |                     |
|  | عمليات RTA       | ۲/۳۷            | ۱/۶VeV              |                     |
| $x_N = 1/\Upsilon'$ .  |                  | 7/44            | 1/88eV              | $1/\Delta eV$       |

<sup>^</sup> سطر ( \* ) مربوط به نمونه های گروه لی[۴۰] می باشد.

شکل(۴-۲۸): نتیجه برازش داده های مربوط به نمونه های مورد مطالعه: لایه روآراستی GaN0.013AS0.987 (مربع، بدون عملیات RTA) و چاه کوانتومی چند گانهGaN0.011AS0.989 در حالتهای قبل(دایره توپر) و بعد (دایره توخالی ) از عملیات RTA با معادله مدل برهمکنش دافعه نواری(خط منحنی) نشان داده شده است.

در این مرحله اثر عملیات RTA روی پارامترهای مدل برهمکنش دافعه نواری ترکیب آلیاژ GaN<sub>0011</sub>A5<sub>0989</sub> را بررسی می نماییم. با استفاده از روابط(۴–۹)، (۴–۱۰) و(۴–۱۱) پارامتر های مدل برهمکنش دافعه نواری برای این آلیاژ را در حالت های قبل و بعد از عملیات حرارتی سریع به دست آوردیم. منحنی های حاصل از این برازش در شکل(۴–۲۸)، و پارامتر های حاصل از این برازش با مدل برهمکنش دافعه نواری در جدول(۴–۳) نشان داده شده است. طبق نتایجی که بدست آوردیم مشاهده می شود که، انرژی تراز Ma تحت تاثیر عملیات حرارتی سریع قرار نگرفته است. این پدیده موضوعی قابل پیش بینی بود، زیرا موقعیت انرژی تراز Ma تحت تاثیر عملیات حرارتی سریع قرار نگرفته است. این پدیده موضوعی قابل پیش بینی بود، زیرا موقعیت انرژی تراز Ma تحت تاثیر عملیات حرارتی سریع قرار نگرفته است. این پدیده موضوعی قابل پیش بینی بود، زیرا موقعیت انرژی تراز ما (تراز نوار رسانش GaAs) نباید در اثر عملیات ATA تغییر کند. در حالی که پس از عملیات ATA پارامتر جفت شدگی مسک کاهش یافته است و انرژی تراز Ma افزایش پیدا کرده است. طبق گزارش های منتشر شده[۴۳،۴۱] پارامتر جفت شدگی Ma با افزایش اختلاف بین انرژی تراز Ma و نقطه ۲ نوار رسانش آلیاژ میزبان، کاهش می یابد. افزایش انرژی تراز Ma به همراه ثابت ماندن انرژی تراز Ma سبب افزایش فاصله بین این دو تراز، و در نتیجه کاهش پتانسیل برهمکنش بین این ترازها گردیده و در مجموع باعث کاهش پارامتر جفت شدگی ۲۰۰۸ گردیده است.

همانطور که پیش از این اشاره کردیم عملیات RTA سبب کاهش نقایص نقطه ای در آلیاژهای ۲۰۰۰ GaNxAS می گردد. بنابراین شاید بتوان گفت که کاهش نقایص نقطه ای در محیط پیرامون اتم های N در آلیاژ، احتمالا روی انرژی تراز ⊾E تاثیر گذاشته است، و سبب جابجایی آبی این تراز و کاهش پتانسیل برهمکنش مدل برهمکنش دافعه نواری گردیده است .

فصل پنجم مطالعه ایتیکی سیستم GaNP

حضور مقدار نیاچیزی نیتروژن در نیمرسیانای GaP ( در حیدود ۲۰۰<sup>۳</sup> ۲۰۰۱) نیر باعث می شود که اتم های نیتروژن حالت های جایگزیده ای شبیه تراز دهنده در گاف نواری GaP ایجاد کنند. جایگزینی اتمهای N به جای اتم های P، با توجه به اندازه کوچک و الکترونگاتیوی بزرگ عنصر N نسبت به عنصر P، می تواند آشفتگی محلی بسیار بزرگی در پتانسیل شبکه ایجاد نماید [۱–۳]. جایگزیدگی اتم های N علاوه بر ایجاد خمش بزرگ در گاف نواریGaP، می تواند باعث ایجاد حالتی شبیه گاف نواری مستقیم در سیستم GaP:N شود، در حالی که آلیاژ GaP نیمرسانایی با گاف نواری غیر مستقیم است. این موضوع باعث استفاده گسترده از GaP:N درساخت دیودهای نورگسیل در محدوده سبز- زرد شده است [۱-۴]. با افزایش تدریجی درصد N ، جفت های نیتروژنی (که آنها را با NNi نمایش می دهند) تشکیل می شوند که خطوط وابسته به آنها را می توان در طیف PL مشاهده کرد. جفت های NNi به صورت ترازهای مجزا داخل گاف نواری میزبان توسعه می یابند. در سیستم GaP، در پایین نوار رسانش در محدوده VNT هاف نواری میزبان توسعه می یابند. در سیستم GaP، در پایین نوار رسانش در محدوده است. [۵] د و طیف PL مشاهده کرد. جفت های GaP، در پایین نوار رسانش در محدوده VNT هاف نواری میزبان توسعه می یابند. در سیستم GaP، در پایین نوار رد انش در محدوده VNT می در این میزبان توسعه می یابند. در سیستم GaP، در پایین نوار رسانش در محدوده VNT می در این مرحله می از می در می در می در می در ایسته به این محدوده ها گزارش شده است. [۵] در این مرحله طول موج نور خروجی از این ترکیب، از سبز به زرد تغییرمی کند [۶۰۲]. با افزایش غلظت N خطوط تیز روی طیف PL محو شده، و قله های نسبتا پهن ساختار نامشخص در طیف PL ظاهر می شوند. در ایس محدوده از غلظت نیتروژن، نور دیودهای نور گسیل به رنگ قرمز در می آید[۸].

مطالعات نظری وتجربی برای یافتن پاسخ به این سؤال که در چه محدوده ای از غلظت نیتروژن تغییر رفتار گاف نواری (از حالت گاف نواری غیر مستقیم به مستقیم) اتفاق می افتد، انجام شده است. بلاییچ<sup>۸</sup>و همکارانش با استفاده از طریق محاسببات سیات سواری شیبه پتانسببات سیل ابرشیبکه ۱۲۵ اتمی<sup>۱۰</sup> پیش بینی کرده اند که، تغییر گاف غیر مستقیم به مستقیم در سیستم GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> ( بیان شده است[۱۰]. رفتار گاف ٪ ۲۰/۴۳ ( بیان شده است[۱۰].

جهت بررسی فرایندهای بازترکیب تابشی در آلیاژ GaNP و نحوه شکل گیری نوار رسانش این ماده، ابتدا ویژگیهای طیف PL این سیستم را بررسی می نماییم و

#### <sup>^4</sup> Bellaich

<sup>90</sup> 512 atom supercell pseudopotential band structure calculations

سپس به بررسی چگونگی تغییر ساختارگاف نواری از غیرمستقیم به شبه مستقیم می پردازیم. بدنبال آن منشاء خمش شدید گاف نواری در این سیستم را، از طریق مدلهای تئوری نیمرساناهای نیتروژندار رقیق، مورد بررسی قرار داده، و در انتها نیز به مطالعه تاثیرات عملیات حرارتی سریع و اثر زیر لایه Si روی خواص اپتیکی آلیاژهای GaNP می پردازیم.

# ۵-۱ بررسی ساز و کار بازترکیب تابشی

# ۵−۱−۱ بررسی ویژگیهای طیف PL

### N ا-۱-۱-۱ بررسی طیف PL با تغییر درصد

در آغاز طیف های PL نمونه های مختلف GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> با درصدهای مختلف نیتروژن را، مورد بررسی قرار می دهیم. در شکل(۵–۱) طیف های PL دمای پایین لایه های روآراسیتی GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> میورد مطالعیه در ایسن پایان نامیه ب



شکل (۵-۱): طیف های PL دمای پایین لایه های روآراستی ۲۹۰۰GaNxP مورد مطالعه در این پایان نامه با ٪۲<۰/۸۱ نشان داده شده است.جهت مقایسه طیفها در راستای عمودی جابجا شده اند.

درصد نیت روژن ٪۲۸۱/۰ × x ، نشان داده شده است. در طیف PL نمونه هایی که دارای درصد نیتروژن پایین تری (٪۸۵/۰ = x معادل با ۵<sup>۰۱</sup> cm<sup>-۱</sup>) هستند، یک سری خطوط تیز که از جفت های متفاوت ۱۸۱ (۵ ≥ ۱) منشاء گرفته اند مشاهده می شود. همانطور که درشکل(۵–۱) دیده می شود با افزایش درصد نیت روژن تا حدود ٪ ۲۴/۰ تابش های تیز ناشی از جفت های ۱۸۱ ضعیف شده و قله های پهن در طیف PL مشاهده می شوند. با افزایش درصد N موقعیت انرژی قله PL به دلیل کاهش گاف نواری دچار جابجایی قرمز شده، و شدت قله PL کاهش می یابد. طبق گزارشات بیلارجـین`` و همکارانش افزایش شدت طیف PL لایه های کپه ای ۲۰ GaNP در دمای اتاق، با افزایش درصد ۸، تا ٪ ۱/۳، مشاهده شده است[۱۸].

**\* Baillargeon** 

<sup>**\* Bulk**</sup>



شکل(۵-۲): تغییر شکل طیف PL (دمای پایین) در آلیاژهای GaNP با افزایش درصد N در یک مقیاس نیمه لگاریتمی را نشان می دهد. طیف PL لایه های آراستی GaNP به صورت - خط پر- ، و چاه کوانتومی چند گانه GaNP/GaP با دایره نشان داده شده است.

| جهت بررسی نمونه هایی که دارای درصد نیتروژن بالاتری هستند، در شکل(۵–۲) تغییرات طیف PL                                    |
|---|
| ـا افـزایـش درصـــد N، بـرای نـمـونـه هـای لایـه روآراســتـی و چـاه کـوانـتـومـی چنـد گـانـه                            |
| GaN <sub>x</sub> P <sub>1-x</sub> /GaP مورد مطالعه در این پایان نامه نشان داده شده است. طیف PL لایه های روآراستیGaNP به |
| صورت - خط پر- ، و چاه کوانتومی چند گانه GaNP/GaP با دایره نشـان داده شده است. با افزایش درصد N                          |
| بک جابجایی قرمز سـراسـری در طیف PL مشاهده می شود که قبلاً هم به آن اشاره شده است. در طیف PL                             |
| مونه هایی که درصـد N کمتری دارند، خطوط تیزی در محدوده eV(۲/۱۰ – ۲/۱۵) مشـاهده می شود که                                 |
| حتمالا از بازترکیب اکســتیون های مقید به جفت های NN₁ ناشــی شــده اند [۲]. در محدوده طیفی ۱/۸ تا                        |
| ۲/۱۵ الکترون ولت چندین ساختار پهن شده مشاهده می شود. این تابشها در طیف های PL همه نمونه های                             |
| فق مشـاهــــده مــــــى شـــــود.   |



شکل (۵-۳): الف - ناپدید شدن تدریجی بخش پرانرژی طیف PL، دراثر تشدید حالتها مرتبط آنها با نوار رسانش نشان داده شده است . ب- وابستگی شدت طیف PL آلیاژهای GaNP ، به درصد N در انرژی های نشری متفاوت . نقطه ها مربوط به نتایج آزمایش هستند و خطوط جهت مقایسه رسم شده اند.

همه ترکیبات مورد مطالعه دارای شکل طیفی مشابهی می باشند. وابستگی شدت این ساختارها به درصد ۸ (به ازای یک انرژی مشخص) یکنواخت نیست، و این موضوع در شکل(۵–۳)ب نشان داده شده است. در واقع آنچه در این شکل دیده می شـود این است که، با افزایش درصد نیتروژن، گذارهای واقع در ناحیه پر انرژی طیف حذف شـده و گذارهای واقع در ناحیه کم انرژی طیف که احتمالا وابسـته به حالتهای خوشـه های نیتروژنی اسـت برای مقادیر مختلف نیتروژن حفظ شـده اند. این شـکل نیز به جابجایی قرمز طیف ۱۹ با افزایش درصد ۸ ، که بیان کننده ناپدید شـدن تدریجی مؤلفه های پر انرژی است اشاره می کند. در طیف افزایش درصد ۸ ، که بیان کننده ناپدید شـدن تدریجی مؤلفه های پر انرژی است اشاره می کند. در طیف های عام شـکل(۵–۲) مشاهده می شود که با افزایش درصد ۸، احتمالا به دلیل تشدید بین ترازهای نزدیک نوار رسانش با نوار رسانش، گذارهای وابسـته به این ترازها از طیف PL حذف می شـود که این موضـوع در شکل(۵–۳)الف نیز نشان داده شده است. در مورد ساختار چاه کوانتومی نیز همین اتفاق رخ داده است با این تفاوت که قله های مربوط به این نمونه ها به دلیل اثر حبس کوانتومی به ازای مقادیر یکسان نیتروژن دارای جابجایی آبی می باشند.



شکل (۵-۴): الف – طیف های PL نمونه های چاه کوانتومی چندگانه GaNP / GaP با غلظت های مختلف N که در دمای ۱۰K ثبت شده اند، ب- شدت تابش قله های طیف PL بر حسب درصد N . خط منحنی جهت مشاهده بهتر رفتار شدت قله ها رسم شده است[۸].

به منظور مقایسه نتایج بدست آمده با گزارشهایی که تا کنون منتشر شده است ، درشکل(۵-۴) الف طیف PL نمونه های گروه تو<sup>۲۲</sup> [۸] که مربوط به ساختارهای چاه کوانتومی چندگانه با ٪۶××٪۱می باشند، نشان داده شده است. همانطور که در این شکل مشاهده می شود، همانند سیستم GaNAs، حضور N باعث ایجاد افت و خیز های پتانسیل شده، و در نتیجه دنباله نواری را در طیف های PL ایجاد کرده است[۸]. دنباله های نواری در شکل(۵-۴)الف از ۶۰۰ meV زیر گاف نواری تاگاف نواری گسترده شده اند. منشاء این دنباله ها ممکن است ترازهای عمیق مربوط به خوشه های N باشد. در شکل (۵-۴)ب ، شدت قله های طیف PL بر حسب درصد N ، نشان داده شده است. با افزایش درصد نیتروژن شدت تابش های مربوط به لبه گاف، تا ٪ مکن است ترازهای عمیق مربوط به خوشه های N باشد. در شکل (۵-۴)ب ، شدت قله های طیف PL بر معب درصد N ، نشان داده شده است. با افزایش درصد نیتروژن شدت تابش های مربوط به لبه گاف، تا ٪ × ۲/۵×، احتمالا به علت کاهش کیفیت اپتیکی نمونه ها، در اثر افزایش توزیع غیر یکنواخت نیتروژن در آلیاژ می باشد.

### PL ا−۱−۱−۲ بررسی وابستگی دمایی طیف

برای بررسی بیشتر ساز و کار طیف PL مشاهده شده، نتایج آزمایشات PL وابسته به دما مورد بررسی قرار گرفته اند. تغییرات دمایی طیف PL مربوط به لایه های روآراستی مطالعه شده GaNP با درصدهای نیتروژن(٪۲> x و ٪۲< x) در شکل(۵-۵) نشان داده شده است . افزایش دما باعث فرار گرمایی حامل های بار از حالتهای جایگزیده و احتمالا شرکت در کانالهای غیر تابشی می شود که این پدیده با کاهش شدت قله طیف PL همراه خواهد بود. از سوی دیگر یک جابجایی قرمز ناشی از افزایش دما به علت کاهش گاف نواری در موقعیت قله طیف قابل مشاهده است. با افزایش غلظت نیتروژن (٪۲ < x) تغییرات محلی ایجاد شده در ترکیب بندی آلیاژ ، به دلیل تغییر شکل خوشه ها ، افزایش تعداد نیتروژن های یک خوشه و کرنش های محلی، تشخیص ساختارهای مجزا را از یکدیگر غیر ممکن می سازد. گذار های نوری ناشی از این ترازها ، با یکدیگر همپوشانی کرده و طیف PL پهن می شود.

PL مقایسه آثار افزایش دما و افزایش غلظت N روی طیف PL



شکل (۵–۵): وابستگی دمایی طیف PL لایه های روآراستی  $GaN_xP_{1-x}$  درمقیاس نیمه لگایتمی الف- با شکل (۵–۵): وابستگی x = x - x = x - x.

با مقایسه شکل های (۵–۲) و (۵–۴) با شکل(۵–۵) مشاهده می شود که، افزایش دما و افزایش درصد N تاثیر مشابهی روی طیف PL می گذارند. جهت مقایسه بهتر، در شکل(۵–۶) طیف PL نمونه های GaNP با درصدهای متفاوت N، که در دماهای مختلفی ثبت شده اند، نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود، گذار های PL مشابهی برای هر سه نمونه ثبت شده است. دراثر افزایش دما، یا با افزایش غلظت N، تعداد گذارهای وابسته به خوشه های کم عمق تر نیتروژن، در هر سه نمونه رو به کاهش می گذارد. خوشه های کیم عصق تر میتروژن، در هر سه نمونه رو به کاهش



شکل(۵-۶): الف- طیف PL نمونه های GaNP با درصدهای N متفاوت که در دماهای مختلفی ثبت شده اند. ب) نمودار آرنیوس شدت PL نمونه های لایه رونشانی xP1-x با درصدهای N: ٪/۱۹(مثلث) ، ٪۲(دایره توخالی) و٪۳/۱ (دایره توپر).

کمتری هستند و در نتیجه تعداد آنــها از نظر آماری باید بیشتر باشد. کم شدن جمعیت حالتهای وابسته به این خوشه ها در اثر دما، یا در اثر تشدید بین این ترازها با نوار رسانش آلیاژ مادر، سبب تشابه رفتار طیف های PL این سه نمونه گردیده است. نتیجه مشاهده شده، این مطلب را تائید می کند که، موقعیت انرژی ترازهای نیتروژن نسبت به تراز خلاء، با افزایش درصد N تغییر نمی کند و این ترازها تحت تأثیر شکل گیری آلیاژ قرار نمی گیرند؛ و در نتیجه احتمالاً تأثیر مستقیمی روی شکل گیری نوار رسانش ندارند. بنابراین با افزایش درصد N و حرکت رو به پایین نوار رسانش، این ترازها به لبه نوار رسانش نزدیک می شود و با نوار رسانش وارد تشدید می شوند.

با وجود این که درصـد N نمونه ها متفاوت اسـت اما قله طیف های PL در دماهای متفاوت در یک محدوده انرژی قرار گرفته اند. در شکل(۵–۶)ب نمودار آرنیوس شدت PL نشان داده شده است. منحنی های رسم شده از برازش رابطه آرنیوس ، رابطه (۵–۱)، با داده های تجربی بدست آمده است[۱۲].

$$I(T) = I(0) / [1 + c_1 e^{-E_1/kT} + c_2 e^{-E_2/kT}]$$
(1- $\Delta$ )

این رابطه از دو عبارت نمایی تشکیل شده است که نشان دهنده دو نوع فعالیت گرمایی متفاوت می باشد. از این رابطه، انرژی های فعال سازی گرمایی Mev ۲۰۰، ۲۰۰، *E*<sup>1</sup> ا + به ترتیب برای نمونه های //۹/۰، //۲ و//۲ = x بدست آمده است. در شکل(۵–۷) نیز کاهش انرژی فعال سازی یک گذار اپتیکی ویژه با افزایش درصد N نشان داده شده است. حرکت رو به پایین لبه نوار رسانش در اثر افزایش غلظت N، سبب کاهش انرژی فعال سازی شده است. مقادیر بدست آمده برای انرژی فعال سازی با کاهش گاف نواری نمونه های <sub>x1</sub> میرازی فعال سازی شده است. مقادیر بدست آمده برای انرژی فعال سازی با کاهش گاف نواری نمونه ماهی <sub>x1</sub> میرازی فعال سازی شده است. مقادیر بدست آمده برای انرژی فعال سازی با کاهش گاف نواری نمونه مای <sub>x1</sub> میرازی فعال سازی شده است. مقادیر بدست آمده برای انرژی فعال سازی با کاهش گاف نواری نمونه مای <sub>x1</sub> میرازی فعال سازی شده است. مقادیر بدست آمده برای انرژی فعال سازی با کاهش گاف نواری نمونه مای <sub>x1</sub> میرازی فعال سازی شده است. مقادیر بدست آمده برای انرژی فعال سازی با کاهش گاف نواری نمونه آزمایشات جذب به دست آمده است[۱۰]، در توافق است. جهت بررسی دقیق تر منشأ طیف های ۱۹ چگونگی تغییرات طیف PL در اثر تغییر دما را با مقدار جابجایی دمایی گاف نواری مقایسـه می نماییم (مقدارگاف نواری از طریق آزمایشـات جذب به دست آمده است[۱۰]). در شکل(۵–۸) ، این جابجایی برای نسمونسه هسای چساه کسوانستومسی چسندگسانسه بسا ٪ = x (دایره تو خالی) و لایه روآراستی ٪ x=۳/۱ (مثلث) نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود میزان جابجایی قله های PL در اثر تغییر دما، از جابجایی گاف نواری در اثر تغییر دما بزرگتر است. با در نظر گرفتن این موضوع ، می توان نتیجه گرفت که طیف های PL از گذارهای تابشی وابسته به حالتهای جایگزیده ناشسی شسده اسست، و از بازترکیب نوار به نوار که مشخص کننده



شکل(۵–۷) : نمودار نمادینی ازتغییرات ساختار نواری آلیاژهای GaNP با افزایش درصد N. در این شکل کاهش انرژی فعال سازی یک گذار اپتیکی ویژه با افزایش درصد N نشان داده شده است.




نشان داده شده است .خط نقطه چین جهت راهنمایی رسم شده است. انرژی های گاف نواری به وسیله آزمایشات جذب[۱۰] به دست آمده است.

شكل (۵-۹): جابجایی استوک بین طیف PLE , PL نمونه چاه کوانتومی چندگانهGaN0.018P0.982 مورد مطالعه.

گاف نواری است، ایجاد نشده اند. به علت وجود حالتهای جایگزیده، افزایش دما اثر شدیدتری روی میزان جابجایی قله طیف PL دارد؛ در حالی که اگر گذارها نوار به نوار باشد، این تغییرات کمتر است. جابجایی استوکی که در شکل(۵–۹) مشاهده می شود، نشان دهنده انرژی جایگزیدگی بزرگی برای حامل های جایگزیده در ترازهای وابسته به N می باشد. مقدار ایسین جابجایی را برای نمونه مورد مطالعه لایه روآراستی GaN0.018P0.982 در دمای پایین، تقریبا ۱۹۰ بدست آوردیم.

در این جا مناسب است یادآوری نمائیم که، در بررسی وابستگی دمایی طیف PL نمونه های GaNAs مشاهده کردیم که ، افزایش دما باعث فعالیت گرمایی اکسیتون های جایگزیده شده و رفتار S شکل درطیف مشاهده کردیم که ، افزایش دما باعث فعالیت گرمایی اکسیتون های جایگزیده شده و رفتار S شکل درطیف PL (جابجایی قرمز – *آبی* – قرمز )مشاهده می شود. در طیف PL وابسته به دمای نمونهٔ <sub>x-1</sub> GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> مرمز )مشاهده می شود. در طیف PL وابسته به دمای نمونهٔ <sub>x-1</sub> GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> مرمز )مشاهده می شود. در طیف PL وابسته به دمای نمونهٔ <sub>x-1</sub> GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> مرمز )مشاهده می شود. در طیف PL وابسته به دمای نمونهٔ <sub>x-1</sub> GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> مرمز )مشاهده می شود. در طیف PL وابسته به دمای نمونهٔ <sub>x-1</sub> GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> مرمز )مشاهده می شود. این جابجایی آبی ای مشاهده نمی شود. این پدیده احتمالاً به درشتکل (۵–۵)الف نشان داده شده است، چنین جابجایی آبی ای مشاهده نمی شود. این پدیده احتمالاً به علت حضور قابل توجه کانال های غیر تابشی در مقایسه با کانال های تابشی در این نمونه ها است. بازترکیب ای می مای مای تابشی در مراکز عمیق وابسته به خوشه های N

# ۵-۲ شواهدی برای تغییر ساختار گاف نواری از غیر مستقیم به شبه مستقیم<sup>۹۴</sup>

همانطور که قبلا اشاره شد حضور N در GaP سبب تغییر مشخصه رفتاری گاف نواری از غیر مستقیم به مستقیم می شود. تغییر رفتار گاف نواری در درصدهای پایین نیتروژن، حدود % ۵ / ۰ ، گزارش شده است [۱۳]. براساس مدلهای تئوری ارائه شده در این زمینه ، ترکیب مؤلفه  $\Gamma_c$  نوار رسانش با سایر حالت های تشکیل دهنده مینیمم نوار رسانش ، جفت شدگی اپتیکی بین این حالت ها و  $\sqrt{\Gamma}$  نوار ظرفیت را افزایش می دهد وسبب ایجاد رفتار شبه مستقیم در گاف نواری این مندگی اپتیکی بین این حالت ها و  $\sqrt{\Gamma}$  نوار نظرفیت را افزایش با افزایش سده، ان می دهنده مینیمم نوار رسانش ، جفت شدگی اپتیکی بین این حالت ها و  $\sqrt{\Gamma}$  نوار ظرفیت را افزایش می دهد وسبب ایجاد رفتار شبه مستقیم در گاف نواری این ماده می شود. براساس گزارشهای منتشر شده، با افزایش درصد N شدت قله طیفهای PL افزایش می یابد [۱۴]؛ که علت این پدیده افزایش قدرت بازترکیب گذارهای نوری در مراکز وابسته به N ، به علت تغییر رفتار گاف نواری از غیرمستقیم به مستقیم ( اثر افزایش ساختار نواری را در مان وری در مراکز وابسته به N می با در ان را گاف نواری از غیرمستقیم به مستقیم ( اثر افزایش افزایش از که علت این با ماین گزارشهای منتشر شده، افزایش درصد N شدت قله طیفهای PL فرزیش می یابد [۱۴]؛ که علت این پدیده افزایش قدرت بازترکیب گذارهای نوری در مراکز وابسته به N م به علت تغییر رفتار گاف نواری از غیرمستقیم به مستقیم ( اثر افزایش ساختار نواری ز غیرمستقیم به مستقیم ( اثر افزایش ساختار نواری (وادی از اوری (عد می شود.

<sup>&</sup>lt;sup>\$\*</sup> Quasidirect
<sup>\$\*</sup>Band –Structure Enhancement

در این بخش، ابتدا جهت تعیین محدوده تغییر رفتار گاف نواری ترکیبات GaNP، وابستگی زمانی طیف PL نمونه های GaNP با درصدهای N متفاوت را بررسی می نمائیم، سپس با بررسی نتایج آزمایشات جذب، تاثیر حضور نیتروژن روی رفتار دمایی گاف نواری GaNP را مورد مطالعه قرار می دهیم.

### ۵–۲–۱ بررســی وابســتگی زمانی طیف PL به منظور تعیین محدوده تغییر رفتار گاف نواری

تحلیل داده های حاصل از اندازه گیری های TRPL نشان می دهد، هنگامی که درصد نیتروژن ترکیبات GaNP به ٪ ۵/۰ نزدیک می شود، تغییر رفتار گاف نواری اتفاق می افتد. به همین دلیل رفتار آلیاژهایی با درصدهای نیتروژن کمتر از درصد بحرانی(٪ ۲۴/۰۰ x)، و بیشتر از آن (٪ ۶/۰۰ x) را مورد بررسی قرار می دهیم. در شکل(۵–۱۰)الف طیف های PL این نمونه ها نشان داده شده است. طیف PL نمونه های مورد مطالعه از همپوشانی تابش های ناشی از بازترکیب اکستیون های مقید به جفت های NN و خوشه های نیتروژنی تشکیل می شود[۲۲]. در طیف PL نمونه GaNP با ٪ ۶/۰ = x، شاهد حذف بخش پر انرژی طیف هستیم. از سوی دیگر در شکل(۵–۱۰)ب اختلاف آشکاری بین زمان و اهلش های PL دو نمونه که در انرژی های یکسانی ثبت شده است مشاهده می شود.

در شــکـل(۵–۱۱) منحنی هـای زمـان واهلش طيف PL آليـاژهـای GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> بـا٪ ۲۴ – x و



شکل(۵-۱۰): الف- طیف های PL نمونه های GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> با ٪ ۲۴ + x = ۰/۶ و ٪ ۲۶ = x ب-نقطه ها نشان دهنده طول عمر تابشی اندازه گیری شده در انرژی های آشکارسازی متفاوت(محور افقی) هستند.کلیه اندازه گیریها در دمای۲K انجام شده است.

٪ ۲/۰ = x در انرژی های نشری متفاوت نشان داده شده است. خطوط رسم شده در این شکل، از برازش رابطه(۲–۵) با داده های حاصل از آزمایشات TRPL بدست آمده است[۱۴].

$$I(t) = C_{fast} \exp(-t/\tau_{fast}) + C_{slow} \exp(-t/\tau_{slow})$$
 (Y- $\Delta$ )

رابطه(۵–۲) حاصل جمع دو عبارت نمایی است، که به مولفه های سریع (fast) و آرام (slow)زمان واهلش طیف PL مربوط می شوند. این پدیده اغلب زمانی مشاهده می شود که طیف PL، از طریق همپوشانی چندین مولفه که در ایجاد طیف PL سهیم هستند، به عنوان مثال بازترکیب اکسیتونهای جایگزیده، ایجاد شده باشد. همانطور که در ایجاد طیف PL سهیم هستند، به عنوان مثال بازترکیب اکسیتونهای جایگزیده، ایجاد شده باشد. همانطور که در شکل (۵–۱۱) دیده می شود که طیف آرای نیمونه با مده باشد. ». ۲۰/۲۴ ایدا کاهش سریع شدت PL به مدت ۶۰ ما ۲۰ ما ۲۰ و سپس کاهش آرام شدت PL به مدت ۲۰ ما در ایجاد به با در ۲۰ ما در ایمونه با ۲۰ ما در ایمونه که در ایمونه می شود که ما در ایمونه با در شمود با ما در ایمونه که در ایمونه ما ما در ۲۰ ما ما در ایمونه با در ما در ما در ما ما در ما در ایمونه که در ما در ۲۰ ما در ما ما در ما در ۲۰ ما در ایمونه که در ایمونه در ما در در ۲۰ ما در ما در ۲۰ ما در ما در ما در ما در ۲۰ ما در در عالی آر در در ۲۰ ما در ۲۰



شکل (۵–۱۱) منحنی های زمان واهلش PL آلیاژهای x = -7 با x = -7 و x = -7 در انرژی های نشری متفاوت.خطوط از طریق (۵–۱۱) منحنی دونمایی برداده های زمان واهلش PL ، باsan ( $\tau_{fast}$ ) =۶۵۰ ( $\tau_{fast}$ ) مربوط به آلیاژ GaN0.0024P0.9976، و GaN0.0024P0.9976 فیت منحنی دونمایی برداده های زمان واهلش  $\tau_{slow}$  ( $\tau_{fast}$ ) مربوط به آلیاژ GaN0.0024P0.9976 و GaN0.0024P0.9976 فیت منحنی دونمایی برداده های زمان واهلش جال می المان ( $\tau_{fast}$ ) منحنی دونمایی برداده های زمان واهلش المان ( $\tau_{fast}$ ) مربوط به آلیاژ GaN0.0024P0.9976 و GaN0.0024P0.9976 فیت منحنی دونمایی برداده های زمان واهلش المان ( $\tau_{fast}$ ) منحنی دونمایی برداده های زمان واهلش ( $\tau_{fast}$ ) مربوط به آلیاژ GaN0.0024P0.9976 و GaN0.006P0.994 فیت منحنی دونمایی برداده های زمان واهلش ( $\tau_{fast}$ )



شکل(۵–۱۲): وابستگی طیفی طول عمر تابشی در دو انرژی آشکارسازی متفاوت، که درشکل داده شده است. روی قدرت بازترکیب گذار های نوری ای که، از ترازهای جایگزیده مربوط به ۸سرچشمه می گیرند تاثیر می گذارد. بنابراین کاهش طول عمرتابشی بیان کننده اثر BSE است. این پدیده نیز به دلیل تغییر ساختار نواری آلیاژ GaNP از گاف نواری غیر مستقیم به مستقیم اتفاق افتاده است. با وجود این، زمان های واهلش بدست آمده برای نمونه های GaNP حتی بعد از تغییر رفتار گاف نواری، بسیار بزرگستر از مقادیری است که در نیمرساناهای گاف نواری مستقیم گزارش شده اند.

پس از تغییر رفتار گاف نواری، نوار رسانش نمونه های GaNP منحصراً از حالت های Γ<sub>c</sub> تشکیل نمی شوند، بلکه مشارکت Γ<sub>c</sub> برای تشکیل نوار رسانش، در کنار بقیه حالت های نوار رسانش افزایش می یابد. در مجموع نتایج آزمایشات TRPL تائیدی بر تغییر رفتار گاف نواری به ازای مقادیر نیتروژن در محدوده ٪ (۵۰ = x می باشد، که این تغییر رفتار علت افزایش قدرت بازترکیب و افزایش بازده نوری آلیاژهای GaNP است.

#### ۵−۲−۵ وابستگی دمایی گاف نواری آلیاژهای نیتروژن دار رقیق GaNP

یکی از شواهد تغییر رفتار گاف نواری GaNP تغییر وابستگی طیفی ضریب جذب بر حسب انرژی فوتون هااست. نتایج آزمایشهای جذب نشان می دهد، با افزایش درصد N وابستگی طیفی ضریب جذب به انرژی فوتون از ( $\alpha \propto E^2$ )که مربوط به نیمرساناهای دارای گاف نواری غیر مستقیم است، به ( $\sqrt{E} \propto \alpha$ ) که بیان کننده رفتار گاف نواری مستقیم(رابطه (۳–۵) و(۳–۶)) است، تغییر می کند. در این قسمت با بررسی نتایج آزمایشات جذب، تاثیر حضور نیتروژن روی رفتار دمایی گاف نواری GaNP را بررسی می کنیم.

در شکل(۵–۱۳) وابستگی طیفی ضریب جذب برای آلیاژهای GaNP در دمای ۲۸ (خط پر) و دمای ۲۵۰۸ (نقطه چین) نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود، درآلیاژهای ۲۰۹ دارای ٪ ۲/۰< ۲، این وابستگی طیفی تقریبا خطی است. برای نمونه GaN<sub>0.013</sub>P قله مشاهده شده در محدوده ۲/۱۹ eV (نزدیک جفت های نیتروژن ۱۸۱۱) مربوط به جذب اکسیتونی می باشد [۱۵]. از برون یابی بخش خطی طیف می توانیم گاف نواری آلیاژ را بدست آوریم. همان طور که انتظار داریم در این شکل کاهش گاف نواری با افزایش درصد ۸، به وضوح مشاهده می شود. بعلاوه مشاهده می کنیم که در همه نمونه ها، گاف نواری با افزایش درما کاهش یافته است، ولی میزان این کاهش با افزایش درصد ۸ در آلیاژهای معونه ها، گاف نواری با افزایش درما کاهش یافته است، ولی میزان این کاهش با افزایش درما ۸ در آلیاژهای معونه می را با می توانیم کام در این شاه یافته است. ولی میزان این کاهش افزایش درما ۲ در آلیاژهای موزان این کاهش کاف نواری با فزایش دما کاهش یافته است، ولی میزان این کاهش با فزایش درما ۸ در آلیاژهای مرونه می ایم در آلیاژهای (GaNAs) بیشتر شده است . افزایش دما باعث کاهش گاف نواری به میزان

در شکل(۵–۱۴) وابستگی دمایی گاف نواری نمونه های مورد مطالعه نشان داده شده است. در این شکل، نقطه ها نشان دهنده داده های بدست آمده از آزمایش جذب هستند. جهت مقایسه وابستگی دمایی نمونه های مربوط به گاف نواری آلیاژGaP نمونه های مربوط به گاف نواری آلیاژGaP برازش شــد، و ســپس ایـن مـنـحـنـی بـرای هـمـه نـمـونـه هـای GaNP مـورد مـطـالـعـه



شکل(۵–۱۳): وابستگی طیفی ضریب جذب برای آلیاژهای GaNP بادرصدهای N متفاوت،در دمای ۲K (خط پر) و دمای ۲۵۰K (نقطه چین) نشان داده شده است.

شیفت داده شد. نتایج حاصل از این برازش در شکل(۵–۱۴) به صورت منحنی خط پر نشان داده شده است. همان طور که در این شکل مشاهده می شود، تغییرات دمایی گاف نواری آلیاژ GaN<sub>0.013</sub>P<sub>0.987</sub> نسبت به سایر نمونه ها آرام تر است. ولی با افزایش درصد نیتروژن(به عنوان مثال در ۲/۱٪ = x) تغییرات گاف نواری در اثر افزایش دما سریع تر می شود، و نحوه تغییر دمایی گاف نواری، مشابه رفتار GaP خالص می شود. از یک سو نتایج آزمایش های جذب رفتار گاف نواری مستقیم را نشان می دهند، ولی از سوی دیگر وابستگی گاف نواری به دما، در نمونه هایی که درصد N بیشتری دارند مشابه رفتار GaP با گاف نواری غیر مستقیم است. برای درک علت این پدیده باید به ساختار نواری توجه نمود.

همان طور که اشاره شد، حضور N در آلیاژ GaP سبب جفت شدگی بین حالت های  $\Gamma - X - L$  نوار رسانش و در نتیجه تغییر ویژگی های نوار رسانش این ترکیب می شود. ویژگی  $\Gamma$  در رفتار لبه نوار رسانش غالب شده در نتیجه آلیاژ همانند یک آلیاژ گاف نواری مستقیم عمل می کند. از



شکل(۵–۱۴): وابستگی دمایی گاف نواری در آلیاژهای «-GaNxP1 با درصدهای N متفاوت. نقطه ها نشان دهنده داده های مربوط آزمایش جذب هستند، و منحنی های خط پر نشان دهنده وابستگی دمایی نمونه های GaNP در وضعیت گاف نواری غیر مستقیم می باشند. وابستگی دمایی گاف نواریGaP (+x=۰ )جهت مقایسه نشان داده شده است.

سوی دیگر، ادغام ترازهای گسترش یافته نوار رسانش با حالتهای جایگزیده مربوط به N جهت تشکیل نوار رسانش آلیاژGaNP، باعث تشکیل شدن ترازهای آمیخته ای در نوار رسانش می شود، که خواص آلیاژ را تحت تأثیر قرار می دهد. بنابراین جهت درک بهتر رفتار دمایی گاف نواری باید حساسیت های دمایی هر دو نوع حالت تشکیل دهنده نوار رسانش، یعنی ترازهای توسعه یافته و جایگزیده در نظر گرفته شود. آزمایشات نشان داده است که، مقدار جابجایی دمایی آسم در آلیاژ GaP از میزان جابجایی استا بیشتر است [10]. در مقابل، از سوی دیگر انتظار داریم ترازهای شدیداً جایگزیده مربوط به N ، به دما حساس نباشند. بنابراین آمیختگی همزمان ترازهای غیر جایگزیده ۲ و ترازهای جایگزیده مربوط به N ، به دما حساس نباشند. بنابراین آمیختگی شود. طبق شکل های (۵–۲۰) و(۵–۲۱)، بر هم کنش با ترازهای جایگزیده، زمانی که لبه نوار رسانش آلیاژ در نزدیکی ترازهای مربوط به N قرار می گیرد (پدیده ای که برای ٪ ۲/۱ = x رخ می دهـد)، شدیداً افزایش می یابد. این موضوع سبب کاهش٪۵۰ جابجایی قرمز لبه جذب در ٪ ۲/۱ = x می گردد. ولی افزایش درصد N و غالب شدن ویژگی آسم آلواز رسانش سبب افزایش سرعت کاهش گاف نواری GaN با افزایش در ما و گرای در مع در در مرحمهای ٪۰/۱ می آلیاژ در می گیرد (پدیده ای که برای که برای که با می کرد. ولی افزایش درصد N و ناب شدن ویژگی آسم آلیاژ در می گیرد (پدیده ای که برای که برای کرانه ۲۰۱۲ می گردد. ولی افزایش درصد N و در درصدهای ٪۰/۱ می آلیاژ در می آلیاژ دوباره به سوی GaP سوی ویدا می کند.

#### ۵-۳ منشاء خمش شدید گاف نواری

همانطور که قبلا نیز ذکر کردیم، یکی از مهم ترین آثار حضور نیتروژن در ترکیبات گروه ۷ – ۱۱۱، ایجاد خمش شدید در گاف نواری این ترکیبات است. استدلال رایج برای این پدیده جابجایی کمینه نوار رسانش به سمت انرژی های پایین تر است. ولی مکانیسم دقیق این جابجایی هنوز دقیقاً مشخص نشده است. بیشتر فرضیات مطرح شده در مورد این موضوع در مدل های ۱. تشکیل نوار ناخالصی و ۲. مدل برهمکنش دافعه نواری و ۳. مدل آلیاژ چند ریخت خلاصه می شوند. تمایز این سه مدل در تکامل ترازهای جایگزیده N و وضعیت نوار رسانش میزبان است. مدل اول بیان می دارد که، کمینه نوار رسانش از بر همکنش بین وضعیت جایگزیدہ ناخالصي های نيتروژن مربوط های به (N های ایزوله، جفت های N و خوشه های نیتروژنی) ایجاد می شود، و نوار رسانش آلیاژ میزبان مشارکتی در تشکیل کمینه نوار رسانش ندارند [۱۶،۱۷]. مدل برهمکنش دافعه نواری، بیان کنندهٔ دافعه متقابل بین ترازهای N ایزوله و حالتهای T نوار رسانش می باشد [۱۸٬۱۹]. در مدل سوم، حضور N باعث ایجاد اختلال سراسری در حالتهای نوار رسانش میزبان، که به آنها حالتهای مختل شده میزبان(PHS)<sup>۹</sup>۰ گفته می شود، میگردد. از سوی دیگر، موقعیت انرژی حالتهای مربوط به خوشه های N ، در اثر شکل گیری آلیاژ تغییر نمی کند و انرژی آنها تثبیت شده است[۲۰،۲۱].

جهت بررسی ساختار نواری آلیاژ «GaN<sub>x</sub>Pı باید به ساختار نواری ترکیب والد آن یعنی GaP، توجه کنیم. همانطور که پیش از این در فصل دوم اشاره کردیم، مطابق شکل(۲-۲) ترتیب انرژی ترازهای ترکیب GaP به صورت  $X_{1c} \to L_{1c}$  بوده و اختلاف انرژی بین  $L_{1c} \to L_{1c}$  و  $T_{1c} \to L_{1c} \to L_{1c}$  در دمای اتاق GaP به صورت ۲۰۲۱ تا ۲۰۰ می باشد[۲۲]. شواهدی نیز، مبنی بر حضور تراز  $X_3$  که کمینه آن زیر  $L_{1c}$ 

\* Perturbed host states

قرار دارد ارائه شده است[۲۴،۲۳] و اختلاف انرژی اندازه گیری شده بین $X_{3c} \to X_{1c}$  در دمای اتاق حدود ۳۱۰ meV می باشد. مقدار تخمین زده شده برای اختلاف

انرژی این ترازها در صفر مطلق از طریق محاسبات تئوری ۲۸۵ meV بوده است [۲۵]. بنابراین ترتیب ترازها را باید به صورت  $\Gamma_{1c} \to \Gamma_{1c} \to I_{1c} \to X_{3c} \to L_{1c} \to \Gamma_{1c}$  مشاهده می شود، باید به صورت  $\Gamma_{1c} \to \Gamma_{1c} \to X_{3c} \to L_{1c} \to \Gamma_{1c}$  مشاهده می شود، کمینه نوار رسانش GaP در راستای (۱۰۱) واقع شده است. قبلا اشاره شد که تبهگنی تراز  $L_{1c}$  به دو حالت  $(1 - 1) + t_2(L_{1c}) + t_2(L_{1c})$  می شکند، و تراز  $X_3$ ، یک حالت  $(X_3)$  والا اشاره شد که تبهگنی تراز  $L_{1c}$  به دو حالت  $(1 - 1) + t_2(L_{1c}) + t_2(L_{1c})$  می شکند، و تراز  $X_3$ , یک حالت  $(X_3)$  والا اشاره شد که تبهگنی تراز  $L_{1c}$  به دو حالت  $(1 - 1) + t_2(L_{1c}) + t_2(L_{1c})$  می شکند، و تراز  $X_3$  یک حالت  $(1 - 1) + t_2(X_3)$  والا اشاره شد که تبهگنی تراز  $L_{1c}$  به دو حالت  $(1 - 1) + t_2(L_{1c}) + t_2(L_{1c})$  می شکند، و تراز  $X_3$  یک حالت  $(1 - 1) + t_2(X_3)$  والا اشاره شد که تبهگنی تراز  $L_{1c}$  به دو حالت  $(1 - 1) + t_2(L_{1c}) + t_2(L_{1c})$  می شکند، و تراز  $X_3$  یک حالت  $(1 - 1) + t_2(X_3)$  والا اشاره شد که تبهگنی تراز  $L_{1c}$  به دو حالت  $(1 - 1) + t_2(L_{1c}) + t_2(L_{1c})$  و تراز  $X_3$  یک حالت  $(1 - 1) + t_2(L_{1c})$  والا میدهد، و در اثر اختلال ایجاد شده به وسیله ناخالصی، وضعیت هایی که دارای تقارن یکسانی هستند، و وارد بر هم وضعیت های  $L_1$  به طور جداگانه با همدیگر ( $1 - 1 + t_{1c} + t_{1c}$ )، و وضعیت های  $L_1$  به طور جداگانه با همدیگر ( $1 - 1 + t_{1c}$ 

یکی از راه های تجربی بررسی نحوه تکامل ترازهای وابسته به N و حالتهای نوار رسانش ترکیب میزبان، مطالعه طیف های حاصل از اندازه گیریهای PLE است. ترازهای مربوط به خوشه های نیتروژنی حتی زمانی که در اثر حرکت رو به پایین نوار رسانش (در اثر افزایش N) با نوار رسانش وارد تشدید می شوند، هنوز هم در طیف های PLE قابل مشاهده اند. علت این موضوع ضعیف بودن قدرت باز ترکیب مستقیم در این آلیاژ، در مقادیر کم N و همپوشانی ضعیف گذارهای نوری مربوط به این نوع باز ترکیب می باشد.

در شکل(۵–۱۵) طیف های PL (خط پر) و PLE ( نقطه چین ) ثبت شده برای آلیاژ های GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> با درصدهای متفاوت N نشان داده شده است. در این طیف ها تعدادی از گذارهای اکسیتونی شناخته شده وابسته به ترازهایN مانند N<sub>A</sub> ( تراز مربوط به نیتروژن های منزوی)، NN<sub>1</sub>



شکل(۵–۵۱): طیف های نرمالیزه PL (خط پر) و PLE ( نقطه چین ) آلیاژ های  $GaN_x P_{1-x}$  مورد مطالعه با درصدهای N متفاوت که در دمای ۲K ثبت شده اند.  $\frac{\Gamma}{g}^{\Gamma}$  گذار اکسیتونی مربوط به گاف نواری مستقیم ( $\Gamma_{15}^{*} - \Gamma_{1}^{*}$ ) می باشد. پیکان ها به گاف نواری آلیاژهاکه از آزمایشات جذب بدست آمده اند[۲۶] اشاره دارد. انرژی آشکارسازی در اندازه گیریهای ۲/۱۰۲ eV،PLE برای ٪۰/۸۰ x >٪۰/۰۵، eV

ودNN (جفت ها) و خوشه های نیتروژنی مشاهده می شوند [۱،۱۷]. حذف تابش های PL با افزایش درصد N از بخش پر انرژی طیف آغاز می شود که نشان دهنده جابجایی قرمز سراسری طیف PL است، که قبلا به آن اشاره کرده ایم. از مشاهده جابجایی قرمز لبه کم انرژی طیف PLE پی می بریم که، مینیمم لبه نوار رسانش با افزایش درصد N به سمت انرژی های پایین حرکت کرده است. اطلاعات دقیق تر در مورد انرژی گاف نواری که از آزمایشات جذب بدست آمده است [۲۶]، در شکل (۵–۱۵) با فلش نشان داده شده است. ساختارهایی که در انرژی های کمتر از گاف نواری در طیف PLE مشاهده می شوند، نشان دهنده گذارهای وابسته به حالت های جایگزیده مربوط به N می باشند [۲۷].

طيف های PLE , PL به دو نکته مهم فيزيکي اشاره مي کنند.

نکته اول: موقعیت انرژی ترازهای مربوط به N ثابت است. می دانیم که با افزایش درصدنیتروژن، مینیمم لبه نوار رسانش به سمت انرژی های کمتر حرکت می کند و در اثر این جابجایی، ترازهای مربوط به N با حالت های نوار رسانش وارد تشدید می شوند. ولیکن چون موقعیت انرژی این ترازها در طیف های PLE و PL ثابت است امکان این که مینیمم لبه نوار رسانش از این ترازها مشتق شده باشد منتفی است.

نکته دوم: نسبت شدت بین گذارهای نوری نزدیک  $F_g^{\ r}$  (یا)، و نزدیک مینیمم لبه نوار رسانش (۱۱)، به عنوان مقیاسی از قدرت بازترکیب، (در انرژی تحریک (۱۱)، به عنوان مقیاسی از قدرت بازترکیب، (در انرژی تحریک (۲/۶ ev پوشی است) با افزایش درصد ۸ شدیداً کاهش می یابد(شکل(۵–۱۶)). این نسبت ( $\frac{1}{I_1}$ ) برای ٪ (۵/۰=×، محدوده ای که تغییر رفتار گاف نواری رخ می دهد، بزرگ است. ولی بعد از آن شدیداً کاهش می یابد. این پدیده نتیجه مستقیم جفت شدگی قوی بین حالت های مینیمم لبه نوار کاهش می یابد. این پدیده نتیجه مستقیم جفت شدگی قوی بین حالت های مینیمم لبه نوار رسانش (نقطه X) و حالت های T، در اثر حضور ۸ است. بدین ترتیب که حالت های مینیمم لبه نوار به مراکز ۸ (شکل(۵–۱۶)) که ترازهای انرژی آنها درون گاف نواری است، در همین محدوده غلظت به مراکز ۸ (شکل(۵–۱۶)) که ترازهای انرژی آنها درون گاف نواری است، در همین محدوده غلظت به مراکز ۸ (شکل(۵–۱۶)) که ترازهای انرژی آنها درون گاف نواری است، در همین محدوده غلظت نیتروژن، تائیدی برای این تغییر رفتار گاف نواری می باشد(که در بخش ۵–۳ نیز به آن اشاره



شکل(۵-۱۶): دایره های خالی نشان دهنده نسبت شدت بین گذارهای نوری نزدیک <sup>۲</sup> g<sup>(</sup>l2) و نزدیک مینیمم لبه نوار رسانش (l1) (در انرژی تحریک ۲/۶ ev ) در طیف PLE، و دایره های تو پر نشان دهنده زمان واهلش طیف PL مربوط به مراکز N، درترکیبات GaNP مورد مطالعه می باشند.

تغییر شکل طیف PLE در محدوده 
$$F_g^{\Gamma}$$
 با افزایش درصد N ،در شکل(۵–۱۷) نشان داده شده است.  
در طیف PLE نمونه GaN0.0005P0.9995 دو ساختار، که یکی در ۲/۸۷۹ eV، مربوط به  $F_1^{\Gamma} = \Gamma_{15}^{\nu} - \Gamma_1^{\Gamma}$ ، و دیگری  
در ۲/۹۶۷eV ، مربوط به  $\Delta = E_g^{\Gamma} + \Delta$  مشاهده می شود.  $\Delta = E_g^{\Gamma} + \Delta$  نشان دهنده گذار نوری بین  $\Gamma_1^{\Gamma}$  نوار رسانش  
و نوار ظرفیت جدا شده در اثر برهمکنش اسپین مدار<sup>۹۰</sup> می باشد. این ساختار عموماً به صورت ضعیف ظاهر  
مـــی گــردد (مشــــابــه ایـــن ســـاخــتـار در طــیـف GaP هــم

<sup>\*</sup> Spin-orbit split off valence band



شکل(۵–۱۷): طیف PLE با افزایش درصد N در نزدیکی الف)ترازهای نیتروژن های جایگزیده ب)  $E_g^{\ \ \Gamma}$ .خطوط جهت مشاهده بهتر رفتار مورد نظر رسم شده اند. جهت سهولت مقایسه، طیفها در راستای عمودی جابجا شده اند.

دیـده شــده اســت[۲۸]). بزرگی  $\Delta$  حـدود ۸۰ meV می بـاشــد کـه بـا مقـادیری کـه برای GaP گزارش شده است همخوانی دارد[۲۸]. همانطور که در شکلهای(۵–۱۷)ب و (۵–۱۸) مشاهده می شود، GaP گزارش شده است همخوانی دارد[۲۸]. همانطور که در شکلهای(۵–۱۷)ب و (۵–۱۸) مشاهده می شود، با افزایش درصد N ساختار  $\Gamma_g^{\ r}$  به دو مؤلفه[  $a_1(\Gamma)$ ] همانطور که در شکلهای(۱۷–۱۷) تجزیه می شود که رفتار آن ها با هم با افزایش درصد N ساختار  $\kappa < 1$  به دو مؤلفه[  $\kappa < 1$  را از خود بروز می دهد که برای درصـدهای × ۱ می مقدار این جابجایی را با رابطه زیر می توان تقریب زد:

$$E_{g}^{\Gamma}(a_{1}(\Gamma)) = 2.876 + 12.756x$$
 (eV) ( $\Upsilon$ - $\Delta$ )

موقعیت قلهٔ دیگر در انرژی ۲/۸۷ ev ثابت بوده و تقریبا مستقل از درصد N است. با توجه به این که حالت  $\Gamma$  موقعیت قلهٔ دیگر در انرژی ، کرنش ایجاد  $\Gamma$  نوار رسانش  $(a_1(\Gamma))$  غیر تبهگن است تنها منشاء ممکن این شکافتگی انرژی ، کرنش ایجاد



شکل(۵–۱۸): انرژی گذارهای مربوط به N ،در طیف های PL ،وگذارهای نوار به نوار بین مینیمم نوار ظرفیت و ترازهای مختل شده نوار رسانش میزبان، به عنوان تابعی از درصد نیتروژن نمونه. اطلاعات دقیق تر در مورد انرژی گاف نواری که از آزمایشات جذب بدست آمده است[۲۶]، در شکل با ضربدر نشان داده شده است. خط چین ها مربوط به نتایج حاصل از برازش مدل BAC می باشد.

شده در لایه GaNP به دلیل عدم تطابق ثابت شبکه آن با زیر لایه GaP است. این میدان کرنشی باعث شکافتگی ترازهای ماکزیمم نوار ظرفیت به ترازهای حفرهٔ سنگین<sup>۱</sup> (hh) و حفرهٔ سبک<sup>۱</sup> (lh) می شود. اختلاف انرژی این دو حالت توسط تئوری پتانسیل تغییر یافته <sup>۱۰۰</sup> مطابق رابطه زیر تخمین زده می شود[۲۹] :

$$E_{hh} - E_{lh} = b(\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{II}) \qquad (f-\Delta)$$

<sup>1</sup> heavy-hole states

<sup>14</sup> light-hole states

**"Deformation potential theory** 

$$+\frac{1}{2}[b(\varepsilon_{\perp}-\varepsilon_{II})+\Delta-\sqrt{\Delta^{2}-2.b(\varepsilon_{\perp}-\varepsilon_{II}).\Delta+9b(\varepsilon_{\perp}-\varepsilon_{II})^{2}}]$$

که در آن b پتانسیال تغییر یافته و  $\mathcal{E}_{II}$  و  $\mathcal{E}_{II}$  مؤلفه های کرنش دو محوری در صفحه  $\mathcal{E}_{II}$  و خارج صفحه <sup>۲۰</sup> می باشند. با این فرض که حضور N تأثیر قابل توجهی روی پتانسیل b نگذارد، میزان تقریبی این شــکافتگی برای آلیاژ GaN0.005Po.995، ۵meV گزارش شــده اســت[۳۰]؛ که حدود یک مرتبه بزرگی از جدایی ایجاد شده بین دو مولفه شکافته شده در طیف PLE اندازه گیری شده در این مطالعه ، کوچکتر  $\Gamma$  است(شکل((-1))ب). بنابراین حالتهای دیگری از نوار رسانش با منشاء متفاوت، از حالت نوار رسانش مانند حالتهای نوار رسـانش X₃ یا L که از نظر انرژی نزدیک حالت ۲ اسـت، باید در این امر دخیل باشند. از آنجایی که در اثر حضور نیتروژن تقارن انتقالی<sup>۲۰</sup> شکسته می شود، بنابراین دره های واگن چهارگانه L به حالت های a1(L)+t2(L) شکافته می شوند و حالت X3 به t(X3) محدود می شود[۲۱]. در حالیکه حالت a1 در اثر حضور N شدیدا مختل شود، ولی حضور نیتروژن روی یک حالت t<sub>2</sub> تقریبا تاثیری نمی گذارد. بنابر این قله ثابت ۲/۸۷ eV روی طیفPLE احتمالا از گذار اپتیکی بین قله نوار ظرفیت و تراز (L<sub>3</sub>) یا t<sub>2</sub>(X<sub>3</sub>) ناشـی شـده است. این گذار که به دلیل اصل بقاء اندازه حرکت در ترکیب مادر GaP ممنوع است، در ترکیب GaNP به دلیل برداشته شدن این محدودیت (در اثر اختلال شدید ایجاد شده توسط نیتروژن) مجاز است. این مسئله با مشاهده خط ۲/۸۷ ev دوی طیف PLE ثبت شده است تایید می شود. متاسفانه به دلیل اینکه خطوط طیفی E<sub>g</sub><sup>Γ</sup> و a<sub>1</sub>(Γ) پهن و ضعیف می باشند، امکان بررسی چگونگی تغییرات آن میسر نشد.

از این نتایج می توان در خصوص ساز و کار غالب برای کاهش گاف نواری آلیاژ های GaNP اطلاعاتی بدست آورد. اولین نتیجه اینکه با توجه به تثبیت انرژی کلیه حالت های وابسته به N (نیتروژنهای ایزوله، جفت و خوشه های نیتروژنی)، با افزایش درصد نیتروژن مینیمم لبه نوار رسانش نمی تواند از حالتهای

<sup>&</sup>lt;sup>\.\</sup> In-plane biaxial strain

<sup>&</sup>lt;sup>\.`</sup> Out-of-plane biaxial strain

<sup>&</sup>lt;sup>\,</sup> Translational symmetry

وابسته به نیتروژن ناشی شده باشد. دوم اینکه نتایج بدست آمده گواهی می دهند که ادغام قابل توجه حالت های نوار رسانش گسترش یافته در اثر حضور نیتروژن عامل اصلی کاهش گاف نواری است. در واقع یک دافعه قوی تر بین حالت مینیمم نوار رسانش و حالت ۲۰ نوار رسانش، با توجه به جابجایی قرمز قابل توجه گاف نواریGaNP که با جابجایی آبی حالتهای بالاتر ۲۰ نوار رسانش در اثر افزایش N همراه شده است در این اندازه گیری ها مشهود است (شکل(۵–۱۸)). بعلاوه با توجه به تغییر در احتمال گذار اپتیکی مشاهده شده در طیف عاط ثبت شده ( شکل های(۵–۱۸)). بعلاوه با توجه به تغییر در احتمال گذار اپتیکی مشاهده شده مینیمم نوار رسانش از حالت شبیه X به حالت شبیه **آ** می شود. این تغییرات بویژه برای مقادیر نیتروژن در مینیمم نوار رسانش از حالت شبیه X به حالت شبیه **آ** می شود. این تغییرات بویژه برای مقادیر نیتروژن در حدود ٪۵/۰ که تغییر رفتار گاف نواری از غیر مستقیم به مستقیم اتفاق می افتد مشهودتر است. طول عمر کوتاه شده اکسیتون های جایگزیده در مراکز وابسته به N که قبلا بدان اشاره کردیم نیز تایید کننده مطالب فوق می باشد. همه این موارد نشانه جفت شدگی قوی القا شده توسط نیتروژن بین حالت های نوار رسانش همی می باشد. همه این موارد نشانه جفت شدگی قوی القا شده توسط نیتروژن بین حالت های نوار رسانش

در اینجا می توان به بررسی این موضوع پرداخت که این مشاهدات تجربی چه بینشی در ارتباط با مدل های فیزیکی مطرح شده جهت توصیف خمش بزرگ گاف نواری آلیاژ های GaNP برای ما فراهم می کند. این بررسی را با مدل تشکیل نوار ناخالصی شروع می کنیم.

۵–۳–۱ بررسـی مدل تشکیل نوار ناخالصی جهت توصیف خمش بزرگ گاف نواری

این مـدل، بر مبنـای پهن شـدگی خطوط طیف PL وابسـتـه بـه N ( مثلا خط NN<sub>1</sub> بـه ازای ٪ x = ۰/۲۴ ) می باشد. این مدل روش ساده ای برای بیان تشکیل نوار رسانش مطرح می کند. براساس این مدل، تعداد ترازهای ناخالصــی زیر نوار رسـانش GaNP به حدی افزایش می یابد، که این ترازها با یکدیگر همپوشانی کرده و نوار پهنی زیر نوار رسانش تشکیل می دهند و در نتیجه لبه نوار رسانش پایین می آید. اما با توجه به شـعاع جایگزیده شدن الکترون در مرکز NN۱ (که حدود<sup>م</sup>۶/۴۹ می باشد)، حداقل غلظت نیتروژن مورد نیاز برای اطمینان از همپوشانی توابع موج حدود ٪۶/۴ = x است[۱۷] . در حالی که مشاهدات تجربی ما کاهش شدید گاف نواری را برای ٪ ۱ >x نشان می دهد، حتی اگر یک جایگزیدگی بزرگتر در حدود ۵۹ / را در نظر بگیریم، حداقل غلظت نیتروژن مورد نیاز برای برآورده شدن آنچه در این مدل مطرح می شود حدود ٪ ۱/۴ = x تخمین زده می شـود[۱۷]. لذا در هر صورت با توجه به شواهد تجربی ثبت شده ، این مدل نمی تواند کاهش گاف نواری نمونه های GaNP مورد مطالعه را توجیه کند.زیرا:

اولا: بیشـینه چگالی اکسـتیون هایی که در آزمایش های PLE انجام شـده ، با یک لامپ زنون (منبع تحریک نمونه ها) ، تولید می شـود (با فرض ٪ ۱۰۰ بودن بازده این فرایند و در نظر گرفتن طول عمر یک میکروثانیه برای یک اکسیتون[۳۱])، تقریباً ۳ مرتبه بزرگی کمتر از میزان ترازهای ایجاد شده به ازای ٪ ۱/۴ =x ، براسـاس پیش بینی مدل تشـکیل نوار ناخالصـی اسـت. ولی خمش نواری در این آزمایشات ثبت شده است.

ثانیا: درمدل فوق انتظار نداریم که که حالت های بالایی نوار رسانش میزبان تحت تأثیر حضور N قرار بگیرند که این موضوع نیز براساس آنچه بحث شد خلاف مشاهدات تجربی ما است. در اینجا باید اشاره کنیم که پهن شدگی آلیاژی غیر همگن<sup>۱۰۰</sup> ترازهای وابسته به نیتروژن در همه آلیاژهای مرسوم مانند AlGaAs و GaPAs نیز مشاهده شده است[۳۲].

#### ۵-۳-۲ بررسی مدل برهمکنش دافعه نواری

**''\*** Inhomogeneous

اکنون به بررسی مدل برهمکنش دافعه نواری می پردازیم. همانطور که در فصل چهارم اشاره کردیم، بر همکنش بین ترازهای جایگزیده وابسته به N و ترازهای گسترش یافته نوار رسانش Γ ماتریس GaP را به دو زیر نوار می شکند که انرژی آنها – مشابه رابطه (۴–۸) – با رابطهٔ BAC که در فصل ۴ راجع به آن صحبت کردیم تخمین زده می شود :

$$E_{\pm}(K) = \frac{1}{2} \left[ (E_{M\Gamma}(K) + E_N) \pm \sqrt{(E_{M\Gamma}(K) - E_N)^2 + 4xC_{NM}^2} \right]$$
 (\$\Delta-\Delta)

انرژی گاف نواری توسط انرژی لبه نوار پایین تر، (E.(O) ، نسبت به قله نوار ظرفیت مشخص می شود. انرژی لبه نوار پایین تر، (E.(O) من در ترکیب GaNP، (GaNP، (O) باید از ترازهای نیتروژن جایگزیده E<sub>N</sub> منشاء گرفته باشد. نتایج بدست آمده از بهترین برازش معادله (Δ-۵) باداده های  $E_8^3$  و مینیمم نوار رسانش بدست آمده در این مطالعه (در دمای ۲ ۲) خط چین هایی است که در شکل(Δ-۸) نشان داده شده است. پارامترهای این برازش عبارتند از : ۲/۷ eV که چین هایی است که در شکل(Δ-۸) نشان داده شده است. پارامترهای این مدل BAC با داده های تجربی نسبتا خوب است. ولی این واقعیت تجربی که موقعیت انرژی ترازهای وابسته به N با تغییر غلظت نیتروژن تغییر نمی کند (شـکل(Δ-۱۵)، (Δ-۱۷))لف، (Δ-۱۸)) با آنچه از مدل BAC به N با تغییر غلظت نیتروژن تغییر نمی کند (شـکل(Δ-۱۵))، (Δ-۱۷))لف، (Δ-۱۸)) با آنچه از مدل BAC انتظار می رود در تقابل است. براساس مدل BAC با افزایش درصد N ترازهای وابسته به N بایستی جابجا شوند.

#### ۵–۳–۳ بررسی مدل آلیاژ چندریخت

در مدل آلیاژ چندریخت برای مطالعه تحول ساختار الکترونیکی GaNP از روش شبه پتانسیل تجربی چند نواری<sup>۱۰</sup> و ابر شبکه های بزرگ به طور اتمی آزاد شده<sup>۱۰</sup> استفاده می شود[۲۱]. این مدل براساس برهمکنش بین ترازهای وابسته به خوشه های نیتروژنی جایگزیده و تعداد زیادی ترازهای مختل شده ماده میزبان یعنی GaP ،که ساختار نواری آلیاژی GaNP را تعیین می کند، می باشد. با افزایش درصد N انررژی وابسته به ترازهای خوشه های نیتروژنی ثابت است. درحالیکه انرژی پایین ترین ترازهای مختل شده میزبان به علت دافعه ناشی از ترازهای بالاتر کاهش می یابد، و بدین ترتیب مینیمم نوار رسانش جدید تشکیل می شود. این توصیف به طور کیفی توافق خوبی با نتایج حاصله از اندازه گیریهایی که در شکل های(۵–۱۵) و (۵– ۱۸) نشان داده شده است دارد.

بنابراین خلاصه نتایج بدست آمده و مباحث مطرح شده عبارت است از:

- ۱. یک تغییر شدید در نسبت قدرت نوسان کنندگی بین گذارهای نوری نزدیک <sup>۲</sup> *E*<sup>s</sup> و مینیمم نوار رسانش مطابق با آنچه بحث کردیم.
- ۲. یک جابجایی آبی شدید در ترازهای مختل شده میزبان  $a_1(\Gamma)$  با افزایش غلظت نیتروژن به همراه جابجایی قرمز در مینیمم نوار رسانش.
  - ۳. تثبیت انرژی ترازهای وابسته به N .
- ۴. ظاهر شدن (L<sub>2</sub>(X یا t<sub>2</sub>(X) در اثر حضور N در آلیاژهای مطالعه شده به صورتی که موقعیت انرژی آنها به درصد N حساس نیست.

نتایج این اندازه گیریها به طور تجربی نشان می دهد که، جفت شدگی قوی بین حالتهای نوار رسانش میزبان به دلیل حضور نیتروژن، باید به عنوان ساز و کار فیزیکی غالب برای کاهش گاف نواری شدید آلیاژهای GaNP در نظر گرفته شود.

<sup>&</sup>lt;sup>11</sup>Multiband empirical psedopotential

**<sup>``</sup>**Atomically relaxed larg suppercells

## 4–۴ تاثیرات عملیات حرارتی سـریع روی خواص اپتیکی آلیاژهای GaNP

همانطور که در فصل چهارم نیز اشاره کردیم، به منظور افزایش غلظت نیتروژن در آلیاژهای نیتروژن دار رقیق، معمولا فرایند رشد در شرایط غیر تعادلی (دمای پایین و . . .) انجام می شود که این موضوع سبب نایکنواختی در توزیع اتمهای نیتروژن و تشکیل انواع نقص های شبکه بلوری که معمولاً به صورت مراکز غیر تابشی عمل می کنند، شده و باعث افت کیفیت اپتیکی نمونه ها می گردد. با توجه به اینکه انجام عملیات حرارتی سریع (RTA) بعد از فرایند رشد یکی از روش های موثر جهت افزایش کیفیت ساختاری و نوری بلورهای رشد داده شده می باشد، در این مرحله قصد داریم تأثیر عملیات حرارتی سریع روی نمونه های GaNP مورد مطالعه که به روش MBE رشد داده شده اند را مورد بررسی قرار دهیم.

درصد نیتروژن این نمونه ها بوسیله اندازه گیری های XRD قبل وبعد از عملیات حرارتی سریع بررسی شده اند، تا اطمینان حاصل شود که تغییر قابل توجهی در درصد N نمونه ها بعد از عملیات RTA رخ نداده باشد. نتایج بررسی چگالی در رفتگی های<sup>۱۰۰</sup> نمونه ها قبل از عملیات حرارتی، به وسیله میکروسکوپ الکترون عبوری نشان می دهد که چگالی در رفتگی ها با افزایش درصد نیتروژن کاهش یافته است. چگالی در رفتگی ها برای نمونه های GaNP مورد مطالعه در جدول(۵–۱) نشان داده شده است.

جدول(۵-۱) چگالی در رفتگی ها برای نمونه های GaNP مورد مطالعه را نشان می دهد.

| درصد نیتروژن (x) | چگالی دررفتگیها            |
|------------------|----------------------------|
| ١/۴٪.            | $\Delta/\Delta \mu m^{-1}$ |
| ١/٨٪.            | $r/r$ $\mu m^{-1}$         |

**Wisfit dislocation density** 

| ۲/۸٪. | $r/1 \mu m^{-1}$ |
|-------|------------------|
|       |                  |

در شکل های (۵–۱۹) و (۵–۲۰) تأثیر عملیات حرارتی سریع بعد از فرایند رشد، روی طیف های PL و PL ثبت شـده دردمای پایین برای نمونه های لایه روآراستی GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> با ٪ ٪/ ، ٪ ٪/ ۱/ ، ٪ = x نشان داده شده است. در همه نمونه ها، عملیات حرارتی سریع به طور همزمان سبب افزایش شدت PL و جابجایی آبی طیف PL ، نسبت به حالت قبل از عملیات حرارتی، گردیده است. از مقایسه طیف های PL نمونه ها ، قبل و بعد از عملیات حرارتی، مشاهده می شـود که شـدت مؤلفه های بخش پر انرژی طیف ای PL در اثر عملیات حرارتی سریع دچار افزایش قابل ملاحظه ای شـده است. این تغییرات ممکن است به دلایل زیر اتفاق افتاده باشـد: ۱-افزایش مجدد گاف نواری به علت خروج اتم های نیتروژن طی عملیات حرارتی، ۲- یکنواخت شـدن توزیع نیتروژن ها در اثر عملیات حرارتی و یا ۳- غیرفعال شـدن تله های غیرتابشی(مراکز غیر تابشی).



شکل(۵–۱۹): طیف ۲K) PL) لایه های روآراستی GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> با ٪ ۲/۸ ، ٪ ۱/۸ ، ٪ x = ۱/۴

قبل(نقطه چین) و بعد(خط پر) از RTA عملیات حرارتی سریع .



شکل(۵–۲۰): طیفهای PLE (۲K) نرمالیزه لایه های روآراستی GaNxP1-x با ٪ ۲/۸ ، ٪ x = ۱/۸ ، قبل(نقطه چین) و بعد(خط پر) از عملیات حرارتی سریع.

نتایج حاصل از اندازه گیری های PLE روی این نمونه ها همانگونه که شکل(۵-۲۰) نشان داده شده است، نشان می دهد که، افزایش مجدد گاف نواری تنها در نمونه ای که دارای ٪ ۲/۸ نیتروژن می باشد، اتفاق افتاده است. از آنجا که نتایج آزمایشهای XRD روی این نمونه ها نشان داده است که غلظت نیتروژن نمونه ها بعد از عملیات حرارتی سریع تغییری نکرده است، افزایش گاف نواری در این نمونه، احتمالا به دلیل یکنواخت شدن توزیع نیتروژنها در اثر حرارت دهی می باشد. نکته دیگری که در شکل(۵-۲۰) مشاهده می شود، کاهش آشکار جابجایی استوک (اختلاف بین قله طیف های PLE و PL و PL)است. این مسئله همانطور که پیش از این نیز اشاره شد، نشان دهنده کاهش پتانسیل جایگزیدگی در نمونه های مورد مطالعه، پس از عملیات حرارتی سریع می باشد.

غیر فعال شدن مراکز غیر تابشی نقش عمده ای در افزایش شدت طیف PL در نواحی با



شکل(۵–۲۱): الف– وابستگی دمایی طیف های فوتولومینسانس نمونه نوعی GaN0.014P0.986 قبل (سمت چپ) و بعد(سمت راست) از عملیات حرارتی سریع. به منظور سهولت در انجام مقایسه، طیفهای مربوطه در راستای عمودی جابجا شده اند. ب– نمودار آرنیوس استخراج شده از داده های نمودار الف. در رسم نمودار آرنیوس شدت طیف هایPL (قبل و بعداز عملیات حرارتی سریع) به مقدار شدت طیف در دمای۲ کلوین نرمالیزه شده اند.

انرژی بالاتر (مربوط به گذارهای تابشی ناشی از اکسیتون های جایگزیده در پتانسیل های کم عمق تر که احتمال به تله افتادن آنها توسط مراکز غیر تابشی بیشتر است) خواهد داشت. غیر فعال شدن مراکز غیرتابشی بعد از عملیات حرارتی سریع بایستی باعث بهبود افت گرمایی طیف PL گردد، برای بررسی تجربی این مطلب طیف های PL وابسته به دما برای نمونه های نوعی را در شکل های (۵–۲۱) و (۵–۲۲) نشان داده شده اند. همانطور که در شکل (۵–۲۱) نشان داده شده است، افزایش دما سبب جابجایی قرمز سراسری طیف PL و کاهش گرمایی شدت طیف گردیده است. همان طور که اشاره شد، فرار گرمایی حاملهای بار از حالتهای جایگزیده و شرکت در کانال های غیر تابشی، علت افت شدت طیف PL می باشد. البته آهنگ این ۲۲)الف، شـدت طیف PL در دمای اتاق بعد از عملیات حرارتی، تا حدود ۱۸مرتبه نسـبت به قبل از عملیات حرارتی افزایش یافته اسـت. این موضوع نشان دهنده غیر فعال شدن قسمتی از مراکز غیر تابشی موجود در نـــــمـــونــــه هـــا در اثـــر عـــمــلـــیـات حـــرارتـــی اســت. در مواردی که بازترکیب نوار به نوار بازدهی بالایی داشــته باشــد، جابجایی آبی شـدیدی، در قله



شکل(۵-۲۲): الف- طیف PL نمونه نوعی GaN0.018P0.982 که در دمای اتاق اندازه گیری شده است. ب- نمودار آرنیوس طیف فوتولومینسانس همان نمونه، قبل (دایره توپر) و بعد(دایره تو خالی) از عملیات حرارتی سریع.

های طیف PL با افزایش دما مشاهده می شود [۳۳]. ولی از آنجا که چنین رفتاری در طیف های PL آلیاژ GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> GaN<sub>x</sub>P ثبت شده در دمای اتاق حتی پس از عملیات حرارتی سریع مشاهده نمی شود، می توانیم بگوییم که بازترکیب نوار به نوار در آلیاژ GaN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> حتی بعد از عملیات حرارتی سریع قابل رقابت با بازترکیب های غیر تابشی نیست. اندازه گیریهای طیف PL در دمای اتاق نشان می دهد که حتی بعد از عملیات حرارتی سریع گذارهای تابشی مربوط به حالتهای جایگزیده وابسته به N همچنان غالب اند. غیر فعال شدن مراکز غیر تابشی بعد از عملیات حرارتی توسط نتایج حاصل از اندازه گیری های واهلش زمانی طیف PL نیزتائید می شود. زیرا انتظار داریم پس از عملیات حرارتی طول عمر حاملهای شرکت کننده در گذارهای تابشی افزایش یابد. نمودارهای واهلش زمانی طیف PL برای نمونه های مورد مطالعه در شکل(۵–۲۳) نشان داده شده است. در این شکل مشاهده می شود که فرایند واهلش غیر نمایی است. شمای کلی این منحنی ها به وضــــوح نشـــان مــی دهــــد کــه واهـلــش طــيف



شکل(۵-۲۳): منحنی های واهلش زمانی PL نمونه های نوعی «-GaN<sub>x</sub>P مورد مطالعه قبل (خطوط نقطه چین) و بعد (خطوط پر) از عملیات حرارتی که در دمای اتاق اندازه گیری شده اند. زمان واهلش های PL برای شدت کل (سطح زیر منحنی طیف PL ) نشان داده شده اندکه به انرژی وابسته نیست.

PL بعد از عملیات حرارتی کندتر شده است. با توجه به آنیکه طول عمر گذارهای وابسته به اتم نیتروژن در نمونه های GaNP در دمای اتاق، طول عمر حاملهای آزاد را بدست می دهد [۳۴]، بنابراین افزایش قابل توجه طول عمر طیف PL گواه خوب دیگری برای این نتیجه است که بعد از عملیات حرارتی مراکز غیر تابشی موجود در نمونه های مورد مطالعه غیر فعال شده و پتانسیل جایگزیدگی نیز کاهش پیدا کرده است. در شکل (۵–۲۳) مشاهده می کنیم که واهلش طیف PL نمونه ها، قبل از عملیات حرارتی، با چگالی در رفتگی ها همخوانی دارد. یعنی زمان واهلش DL نمونه ای که درصد نیتروژن بالاتری (چگالی دررفتگی کمتری) دارد، کندتر است. ولی پس از انجام عملیات حرارتی نمونه ها رفتار واهلش مشابهی از خود بروز می دهند. با توجه به این که چگالی در رفتگی ها در ساختار بلوری تحت عملیات حراتی تغییر نمی کند، بنابراین مراکز غیر تابشی، که پس از عملیات حرارتی غیر فعال شده اند، نقص های نقطه ای می باشند. این نقایص طی واهلش کرنش<sup>۸</sup> لایه رو آراستی GaNP روی زیر لایه شکل می گیرند. همچنین، افزایش زمان واهلش طیف PL بعد از عملیات RTA ، گواه دیگری برای کاهش پتانسیل جایگزیدگی در اثر عملیات حرارتی در نمونه های مورد مطالعه میباشد. بنابراین از بررسی آثار عملیات حرارتی سریع، بعد از فرایند رشد، روی خواص اپتیکی ساختاری GaNP با مقادیر ٪ ۲/۸ × x > // ۱/۱ نتیجه می گیریم که، با انجام عملیات حرارتی پتانسیل جایگزیدگی در نمونه های مورد مطالعه کاهش یافته و بازده بازتر کیب های تابشی به طور قابل توجهی ( به خصوص در دمای اتاق) افزایش می یابد. این نتیجه با مشاهده کاهش جابجایی استوک بعد از عملیات حرارتی، کاهش افت شدت PL با افزایش دما ، مشاهده ۸۸ برابر شدن شدت طیف PL در دمای اتاق و ۲ تا ۳ برابر شدن طول عمر حاملها در دمای اتاق ، پس از عملیات حرارتی به خوبی مورد تأثید قرار می گیرد. مرد برایز یکسان باقی ماندن خصوصیات نهادینه طیف PL نشان دهنده ساز و کار های مشابه PL برای نمونه همچنین یکسان باقی ماندن خصوصیات نهادینه طیف PL نشان دهنده ساز و کار های مشابه PL برای نمونه

### ۵-۵ اثر زیرلایه Si بر خواص اپتیکی آلیاژ GaNP

همانطور که قبلا اشاره شد، حضور نیتروژن در ترکیب GaP علاوه بر ایجاد خمش شدید در گاف نواری این ماده سبب کاهش ثابت شبکه این آلیاژ نیز می گردد. با توجه به اینکه ثابت شبکه GaP و Si بسیار به هم نزدیک است (جدول (۵–۲)) ، حضور مقدار اندکی نیتروژن نیز سبب کاهش این اختلاف می گردد. این ویژگی سبب شده که آلیاژهای ۲۰۰<sub>×</sub> GaN<sub>x</sub>P<sub>1</sub> مناسبی جهت رشد روی زیر لایه Si برای کاربرد در قطعات اپتوالکترونیکی جدید و مدارهای مجتمع باشند. سیلیکون از نیمرساناهای گروه ۱۷ است که به سبب فراوانی در طبیعت و کیفیت بالای قطعاتی که از آن ساخته می شود، بسیار مورد توجه است. این نیمرسانا در الکترونیک و سلول های فوتوولتائیک کاربردهای فراوانی دارد. سیلیکون فوق خالص که به منظور کنترل پاسخ الکتریکی

<sup>108</sup> strain relaxation

آن آلایش شده باشد، در ترانزیستور ها، مدارهای مجتمع، میکروپروسسورها و آشکارسازهای نیمرسانا کاربردهای گسترده ای دارد. در فوتونیک سیلیکون به عنوان موج پیوسته لیزر رامان استفاده می شود، ولیکن به علت غیر مستقیم بودن گاف نواری آن از بازدهی اپتیکی بالایی برخوردار نیست. Si همچنین در تکنولوژی ساخت LCD ها و سلول های خورشیدی ارزان قیمت کاربرد فراوانی دارد. با توجه به کاربردهای گسترده سیلیکون در صنایع الکترونیک و اپتوالکترونیک یافتن نیمرساناهایی با بازده اپتیکی بالا که قابلیت رشد روی Si را دارا باشند امری مفید وضروری به نظر می رسد. به همین جهت در این بخش قصد داریم خواص اپتیکی لایه های روآراستی GaNP با زیر لایه Si را، با خواص اپتیکی لایه های روآراستیGaP دارای زیر لایه Ga

به این منظور نتایج حاصل از آزمایشهای PL و TRPL ، PLE و اندازه گیریهای طیفهای PL وابسته به دمای نمونه های لایه روآراستی GaN0.018P0.982/Si و GaN0.018P0.982/GaP مورد مطالعه در این پایان نامه را بررسی می نماییم. در جدول(۵–۲) چگالی در رفتگی های نمونه های GaNP مورد مطالعه نشان داده شده است.

جدول(۵-۲) چگالی در رفتگی های نمونه های GaN0.018P0.982 مورد مطالعه با زیر لایه های GaP و Si .

| زير لايه | ثابت شبکه (A°) | چگالی دررفتگیها  |
|----------|----------------|------------------|
| Si       | ۵/۴۵۰۶         | $\mu m^{-1}$     |
| GaP      | ۵/۴۳۱۰         | $r/r \mu m^{-1}$ |

ثابت شبکه آلیاژها را می توان با استفاده از قانون وگارد<sup>۱۰۰</sup> محاسبه نمود. از این طریق و با استفاده از جدول(۲-۲)، ثابت شبکه نمونه های GaN0.018P0.982 مورد مطالعه به صورت زیر بدست می آید[۳۵]:

$$a_{GaNP} = xa_{GaN} + (1 - x)a_{GaP} \tag{9-a}$$

**''** Vegard's Low

$$a_{GaNP} = (\cdot/\cdot \lambda)(\forall/\lambda \land A^{0}) + (\cdot/\land \lambda \Upsilon)(\Delta/\diamond A^{0})$$
 (V- $\Delta$ )

$$a_{GaNP} = \Delta/\mathbf{f} \cdot \mathbf{q} \mathbf{A} \mathbf{A}^0 \tag{A-\Delta}$$

در نتیجه مشاهده می شود که ثابت شبکه آلیاژهایGaNP مورد مطالعه(۵٬ ۹۸ ۹۰ ۹۰/۵۰ مرد می شود که ثابت شبکه Si (۴۳۱۰۵۰ /۵) بسیار نزدیک است[۳۶].

در شکل (۵–۲۴) طیفهای PL و PL لایه های روآراستی GaN0.018P0.982 با زیر لایه های GaP (مثلث) و Si (دایره) ، که در دمای ۲K اندازه گیری شده اند ، نشان داده شده است. در طیف PL هر دو نمونه یک قله پهن در محدوده PL مشاهده می شود. در طیفهای PLE هر دو نمونه نیز، یک قله پهن جذب که انرژی آن از V ۲/۲ کمتر است(کمتر از انرژی گاف نواری GaP در GaP در V ۲/۳۲۸ که ناشی از بازترکیب اکسیتون های آزاد می باشد[۳۷]) مشاهده می شود. موقعیت قله طیف های PLE در دو نمونه، نشان می دهد که گاف نواری نمونه ها تقریبا با هم برابر است. همانطور که در



شکل(۵-۲۴) طیفهای نرمالیزه PL و PLE لایه های روآراستی مورد مطالعه GaN0.018P0.982 با زیر لایه های GaP (مثلث) و Si در دمای۲۲ اندازه گیری شده اند.

شکل(۵-۲۴) مشاهده می شود طیفهای PL و PL و مر دو نمونه خصوصیات مشابهی دارند. بیشتر پارامترهای مهم مربوط به خواص اپتیکی نظیر: شدت قله PL ، شکل طیف ، پهنای طیف در نصف ماکزیمم و موقعیت انرژی گسیلی هر دو نمونه ، قابل مقایسه هستند. شدت طیف PL لایه روآراستیGaN0.018P0.982 با زیر لایه GaP ، حدودا ۲/۵ برابر شدت طیف PL نمونه دارای زیرلایه SI است. این اختلاف به علت جذب نور فرودی توسط زیرلایه Si می باشد. پهنای طیف PL در نصف ماکزیمم هر دو نمونه کاملا یکسان است. پهنای طیف PL در نصف ماکزیمم به چگالی نقایص ماده مربوط میشود و کاهش آن، نشان دهنده بهبود کیفت بلوری است. همانطور که در شکل(۵-۲۴) مشاهده می شود، جابجایی استوک بین طیفهای PL و PL هر دو نمونه تقریبا یکسان است، که این موضوع نشان دهنده تشابه میزان پتانسیل جایگزیدگی این نمونه ها می باشد.

شواهد بیشتر مبنی بر قابل مقایسه بودن کیفت بلوری نمونه ها از طریق آزمایشات وابستگی دمایی طیف PL ، بدست می آید. همان طور که قبلا اشاره کردیم، افزایش دما سبب یونش گرمایی



شکل(۵-۲۵) وابستگی دمایی طیفهای PL نمونه های لایه روآراستی GaN0.18P0.982 مورد مطالعه با زیر لایه های الف- Si و ب- GaP.

مولفه های بخش پر انرژی طیف و همچنین جابجایی قرمز موقعیت بیشینه قله های طیف می شود. این رفتار دمایی در شکل(۵–۲۵) برای هر دو نمونه نشان داده شده است. از سوی دیگر، برازش معادله آرنیوس، رابطه(۵–۱)، با داده های بدست آمده از اندازه گیری های دمایی روی نمونه های مورد مطالعه ، نیز نشان می دهد که هر دو نمونه از پایداری دمایی مشابهی برخوردارند. در شکل(۵–۲۶) الف منحنی های حاصل از این برازش، و در جدول(۵–۳) نتایج محاسبات مربوط به آن نشان داده شده است. انرژی های فعال سازی گرمایی نسبتا مشابهی که برای نمونه دارای زیرلایه GaP، از برازش معادله آرنیوس، برازش، و در جدول(۵–۳) نتایج محاسبات مربوط به آن نشان داده شده است. انرژی های فعال سازی گرمایی نسبتا مشابهی که برای نمونه دارای زیرلایه GaP، از برازش معادله آرنیوس، بدست آمده است، نشان دهنده وجود ساز و کار های فعال سازی گرمایی مشابه در هر دو نمونه می باشد.

جدول(۵–۳): انرژی های فعال سازی گرمایی نمونه های GaNP مورد مطالعه با زیرلایه های متفاوت.





شکل(۵–۲۶): الف- سطح زیر نمودار طیفهای PL نمونه های GaN0.18P0.982 مورد مطالعه در دماهای ۲ تا ۲۸۰ درجه کلوین با زیر لایه های GaP (مثلث) و Si(دایره) را نشان دهد. خط های رسم شده نیز از طریق از برازش معادله آرنیوس با این داده ها بدست آمده است. ب- طیفهای PL نمونه های مورد مطالعه GaN0.18P0.982 با زیر لایه های GaP (مثلث) و Si(دایره) که در دمای اتاق ثبت

شده اند.

بودن کیفیت ساختاری این دو نمونه می باشد.

در شکل(۵–۲۶)ب طیفهای PL این نمونه ها که در دمای اتاق ثبت شده اند، نشان داده شده است. شدت طیف PL دمای اتاق لایه روآراستی GaN<sub>0.018</sub>P<sub>0.982</sub> با زیر لایه GaP نیز ، حدودا ۲/۵ برابر شدت طیف PL نمونه دارای زیرلایه Si است. تشابه شکل طیفهای PL و پهنای طیفهای PL در نصف ماکزیمم و موقعیت انرژی نشری هر دو نمونه ، دلیل دیگری برای قابل مقایسه بودن کیفیت ساختاری این نمونه ها می باشد.

در انتها نتایج بدست آمده از آزمایشات TRPL مربوط به این نمونه ها را ، که در دماهای ۲ درجه کلوین و دمای اتاق ثبت شده اند، بررسی می نماییم. در شکل(۵–۲۷) نمودار زمان واهلش شدت کل PL بر حسب زمان، برای نمونه های مورد مطالعه نشان داده شده است. خطوط رسم شده در شکل، از برازش رابطه(۵–۲) با داده های حاصل از آزمایشات TRPL بدست آمده است. مقادیر زمان واهلش که از برازش رابطه مذکور با داده های زمان واهلش PL بدست آمده اند در جدول(۵–۴) نشان داده شده است.

شکل(۵–۲۷): نمودار زمان واهلش شدت کل PL بر حسب زمان ، مربوط به نمونه های لایه روآراستی مورد مطالعه GaN0.18P0.982 با زیر لایه های GaP (مثلث) و Si(دایره) که در دمای الف-پایین ب- اتاق ثبت شده اند.

نتایج بدست آمده از اندازه گیریهای TRPL نشان می دهد، که زمان واهلش PL در بخش پر

انرژی طیف PL سریع تر است. زیرا همان طور که قبلا اشاره کردیم در این حالت انتقال انرژی از حالتهای کمتر جایگزیده به کانالهای رقابتی از جمله مراکز غیر تابشی آسان تر است. همانطور که در شکل(۵–۲۷) ودر جدول(۵–۴) نشان داده شده است، واهلش PL برای نمونه های رشد داده شده روی GaP مشابه می باشد، که این مطلب نشان دهنده مشابهت آهنگ انجام فرایند های غیر تابشی در دو نمونه است. کاهش قابل توجه طول عصر واهلی والا

جدول(۵–۴): مقادیر زمان واهلش PL که از برازش رابطه(۵–۲) با داده های TRPL نمونه های GaN0.18P0.982 با زیرلایه های GaP و Si که در دمای پایین و دمای اتاق ثبت شده اند.

| زير لايه |                       | زمان واهلش در دمای پایین(nsec) | زمان واهلش در دمای اتاق (nsec) |
|----------|-----------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| Si       | $	au_{\it fast}$      | ٢۵                             | •/• ۵                          |
|          | ${	au}_{\it slow}$    | ١٣۵                            | •/۴١                           |
| GaP      | ${	au}_{\it fast}$    | ۲۰                             | • / • Y                        |
|          | $	au_{\mathit{slow}}$ | ۱۳۰                            | ۰/۴۸                           |

دهنده افزایش نقش گذارهای غیر تابشی در دماهای بالا است. اگر چه ممکن است با توجه به متفاوت بودن چگالی در رفتگیها در نونه های رشد داده شده روی زیر لایه Si و GaP، قابل مقایسه بودن کیفیت اپتیکی مشاهده شده قدری عجیب به نظر می رسد، اما بایستی در اینجا این نکته را یادآور شویم که معمولا نقص های نقطه ای منشاء پیدایش مراکز غیر تابشی هستند.

بنابراین با توجه به مباحث مطرح شده می توانیم نتیجه بگیریم که کیفیت اپتیکی و کیفیت ساختاری آلیاژهای GaN<sub>0.018</sub>P<sub>0.982</sub> مورد مطالعه که روی زیر لایه Si رشد داده اند، با کیفیت اپتیکی و ساختاری آلیاژهای GaN<sub>0.018</sub>P<sub>0.982</sub> دارای زیر لایه GaP قابل مقایسه می باشند و این آلیاژها گزینه مطلوبی جهت رشد روی زیر لایه Si برای کاربرد در قطعات اپتوالکترونیکی و مدارهای مجتمع جدید می باشد.

### مطالعه اپتیکی سیستم GalnN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub>

◄ بررسی طیف PL ◄ وابستگی دمایی طیف PL ◄ بررسی رفتار طیف PL با افزایش شدت تحریک ◄ وابستگی زمانی طیف PL

ترکیبات نیمرسانای چهارتایی «Gao.5Ino.5N«P1 که ثابت شبکه ای قابل تطابق باGaAs دارند، به سبب کاربردهای وسیع آنها در ساخت قطعات اپتوالکترونیکی، اخیرا مورد توجه محققین قرار گرفته است[۱،۲]. همانطور که در فصول قبل اشاره شد، تاثیر قابل توجه نیتروژن روی نوار رسانش نیمرساناهای گروه ۱۱۱۷ که منجر به خمش بزرگ گاف نواری این ترکیبات می شود، پدیده ای شناخته شده است، و روی ساختار آلیاژ GaInPنیز باعث آثار مشابهی می شود. این قابلیت سبب افزایش کارایی ترکیبات GaInNP نسبت GaInNP
گردیده است، و آنها را به قطعاتی مناسب برای کاربرد در امیتر<sup>۱۱</sup> و کلکتورهای<sup>۱۱</sup> پیوندگاه n-p-n گردیده است، و آنها را به قطعاتی مناسب برای کرده است[۳،۴] بدین ترتیب، جهت شناسایی پتانسیل ترانزیستورهای دو قطبی ناهمگون<sup>۱۱</sup> (HBTS) تبدیل کرده است[۳،۴] بدین ترتیب، جهت شناسایی پتانسیل های بالقوه این آلیاژ جدید باید خواص اپتیکی و ساختار الکترونیکی آن با جزئیات کامل شناخته شود. علی رغم مطالعات انجام شده روی آلیاژهای GalnNP/GaAs هنوز دانش ما راجع به مکانیسم خواص اپتیکی و الکتریکی این ترکیبات کامل شناخته شود. علی وغم مطالعات انجام شده روی آلیاژهای GalnNP/GaAs هنوز دانش ما راجع به مکانیسم خواص اپتیکی و الکتریکی این ترکیبات کافی نیست. در این بخش با بررسی نتایج حاصل از اندازه گیریهای طیف فوتولومینسانس نمونه های لایه روآراستی GaAs، ماره و Galo این و Galo این مطالعه فرایندهای بازترکیبی در این آلیاژ می پردازیم.

#### ۶–۱ بررسی طیف PL

در شـکل(۶-۹)الف طیف های نوعی PL ثبت شـده در دمای پایین نمونه های لایه روآراسـتی مورد مطالعهGa0.49In<sub>0.51</sub>N<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub>/GaAs نشـان داده شده است. همانگونه که در این شکل مشاهده می شود، با افزایش درصـد۸، جابجایی قرمز بزرگی در طیف PL نمونه های مورد مطالعه اتفاق افتاده اسـت(شکل(۶–۲))، که این پدیده همانند سـایر آلیاژهای نیتروژن دار رقیق ، ناشـی از خمش بزرگ گاف نواری این آلیاژها در اثر حضور نیتروژن می باشد[۵،۶۰۷]. به طور واضح در این شکل مشخص است که نمودار طیف PL در دمای پایین برای نمونه های حاوی نیتروژن پهن و نامتقارن است.

<sup>&</sup>lt;sup>W</sup> Emitter

**<sup>&</sup>quot;" Collector** 

<sup>&</sup>quot; Hetero junction Bipolar Transistor



شکل (۶-۱): طیف های PL نوعی نمونه های روآراستی مورد مطالعه GalnNxP1-x/GaAs ثبت شده الف-در دمای پایین و ب- دمای اتاق.



شکل(۶-۲): جابجایی قرمز قله های طیف PL نمونه های مور مطالعه با افزایش درصد N در دمای پایین. منحنی جهت سهولت مقایسه رسم شده است.

در طیف PL دمای پایین یک قطع تیز در انرژی های بالا و یک دنباله نمایی نسبتا بلند در انرژی های پایین دیده میشود. این رفتار منحنی PL یک رفتار مرسوم برای باز ترکیب تابشی ناشی از به تله افتادن اکسیتون ها/حامل های بار در حالت های دنباله نواری است، و نشانگر یک جایگزیدگی قوی در اثر حضور نیتروژن می باشد. مشابه این رفتار در سایر ترکیبات نیتروژن دار رقیق نیز مشاهده می [۵،۸]. در شکل(۶–۱)ب طیف PL ثبت شده در دمای اتاق نمونه های مورد مطالعه نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود برای نمونه بدون نیتروژن به دلیل کاهش گاف نواری با افزایش دما، شاهد جابجایی قرمز قله های طیف RT-PL نسبت به LT-PL (حدود VimeV) هستیم. همچنین در این شکل پهن شدگی منحنی طیف PL در اثر افزایش دما مشاهده می شود. برای نمونه های نیتروژن دار، طیف RT-PL ناشی از باز ترکیب اکسیتون های آزاد یا حامل های بار آزاد می باشد. مکانیسم مشخص این باز ترکیب ( اکسیتون آزاد یا حامل بار آزاد) را در قسمت های بعدی مورد بحث قرار خواهیم داد.

### ۶-۶ وابستگی دمایی طیف PL

PL جهت بررسی مکانیسم بازتر کیبهای تابشی در آلیاژهای GaInNP ، ابتدا وابستگی دمایی طیف PL نمونه های مورد مطالعه این آلیاژ را بررسی می نماییم. در شکل(۶–۳) و(۶–۴) وابستگی دمایی طیف PL نمونه های مورد مطالعه با ۰، ۵/۰ و ۱ درصد نیتروژن نشان داده شده است. همانطور که در شکل(۶–۳)ب و (۶–۴) نشان داده شده است. همانطور که در شکل(۶–۳)ب و (۶–۴) نشان داده شده است. همانطور که در شکل(۶–۳)ب و (۶–۴) نشان داده شده است. همانطور که در مکل(۶–۳)ب و دورت نشان داده شده است. همانطور که در شکل(۶–۳)ب و نمونه های مورد مطالعه با ۰، ۵/۰ و ۱ درصد نیتروژن نشان داده شده است. همانطور که در شکل(۶–۳)ب و نمونه های مورد مطالعه با ۰، ۵/۰ و ۱ درصد نیتروژن نشان داده شده است. همانطور که در شکل(۶–۳)ب و نمونه های مورد مطالعه با ۰، ۵/۰ و ۱ درصد نیتروژن نشان داده شده است. همانطور که در شکل می دهند. به دورت از می داده شده است. مای داده شده است. قله طیف عا دورت در به داوی نیتروژن یک رفتار ۵ در می دوند. به عنوان مثال برای نمونه حاوی ۵/۰درصد نیتروژن، با افزایش دما (درمحدوده ۸۰۲ × ۲ > ۵) ، شاهد جابجایی قرمیز بیزرگی در میوقیعییت بیشیینیه قیلیه های میسی در می دورت در میونه حاوی داره می داده می داده می در میونه حاوی در میونه حاوی ۵ در میونه حاوی ۵ در می در میونه می داده در می در میوزنه با افزایش دما (درمحدوده ۸۰ × ۲ > ۵) ، شاهد جابجایی قیرمیز بیزرگی در میوقیعییت بیشیینیه قیلیه های عای عای عام در میونه حاوی در میوقیعییت بیشیینیه قیلیه های داده در میونه حاوی در میوقیعییت بیشیینیه قیلیه های داده در میونه داده میونه داده در میوقیعییت بیشیینه قیلیه های داده در میونه داده در میوقیعییت بیشیینه قیلیه میوان میوانه داده در میوقیعییت بیشییند. به میوانه میوانه داده در میونه داده در میونه داده در میوقیعییت بیشییه میوانه داده در میوانه داده در میونه داده در میوانه داده در میوانه میوانه میوانه داده در میوانه در میوانه داده در در میوانه داده در در میوانه داده در میوانه د



شكل(۶-۳): وابستگی دمایی طیف PL نمونه های لایه روآراستی مورد مطالعه الف- GaInP و ب- GaInN 0.005P



شكل(۶-۴): وابستگی دمایی طیف PL نمونه روآراستی مورد مطالعه: GalnN0.01 P0.99.

این جابجایی قرمز که در بیشینه های طیف PLدر دماهای پایین مشاهده می شود، پدیده ای عمومی در مورد گذارهای نوری ای است که از حالت های جایگزیده سرچشمه می گیرند. این پدیده نشان دهنده فعال سازی گرمایی حامل ها به وضعیت های غیر جایگزیده (کم شدن جمعیت حالت های جایگزیده) و شرکت آنها در فرایندهای بازترکیبی رقابتی است. در دماهای بیشتر از ۸۰ درجه کلوین، مولفه جدیدی در بخش پرانرژی طیفP ظاهر می شود، که به تدریج با افزایش دما، به مولفهٔ غالب طیف PL تبدیل می شود. ما، این مولفه جدید را به بازترکیب حامل های آزاد/ اکسیتونهای آزاد نسبت می دهیم. این نتیجه از بررسی شکل طیف PL نمونه های مورد مطالعه یعنی، ظاهر شـدن یک دنباله نواری در بخش پر انرژی طیف PL که شـیب آن با افزایش دما کاهش پیدا می کند، حاصل شده است. پس از این مرحله، با افزایش دما تابش های PL پر انرژی ناشـی از لبه گاف نواری دچار جابجایی قرمز می شـوند که این پدیده نشـان دهنده کاهش گاف نواری، Fg، آلیاژ در اثر افزایش دما است.

همانطور که در مورد آلیاژهای GaNAs نیز اشاره کردیم، با توجه به رفتار دمایی طیف PL ، می توانیم رفتار دمایی گاف نواری نمونه های مورد مطالعه را، بررسیی نماییم. وابستگی دمایی گاف نواری آلیاژهای سای (مایدازه گیری طیف های x = ۰/۵) برای (مای سان دازه کی مان دازه کی  $x = - \frac{1}{2}$  و  $x = -\frac{1}{2}$ 

جدول(۶-۱): نتایج محاسبات پارامترهای برازش مدل وارشنی مربوط به آلیاژهای مورد مطالعه S = ۰/ یا X = ۰/ یا x = ۰/ و

| درصد N درترکیب GaInN <sub>x</sub> P <sub>1-x</sub> | $E_g(T=0)$ (eV) | lpha (eV/K)                 | $\beta$ (K) |
|--|-----------------|-----------------------------|-------------|
| GaInP  | ١/٩۶۵           | $\Delta/F \times 1 \cdot F$ | ۲۵۰         |
| GaInN <sub>0.005</sub> P <sub>0.995</sub>          | ١/٩             | ٣/٩ × ١٠ <sup>-۴</sup>      | ۲۵۰         |

PL وابسته به دما بدست آمده اند، در شکل((-0) نشان داده شده است. برای نمونه هایی که درصد N بیشتری دارند، به علت جایگزیدگی شدید مقادیر گاف نواری، فقط در محدوده دمایی بیشتر از X ۲۵۰ بدست میآیند. رفتار دمایی گاف نواری هر دو نمونه مورد بحث با مدل وارشنی، رابطه((+-4))، قابل انطباق است[(-4)]. پارامترهای برازش مدل وارشنی بر داده های نشان داده شده در شکل((-7)) در جدول((-1)) نشان داده شده است. پارامتر تجربی  $\alpha$  در معادله وارشنی نشان دهنده میزان تغییرات



شکل(۶-۵): وابستگی دمایی گاف نواری آلیاژهای Ga0.47In<sub>0.51</sub>N<sub>x</sub>P1-x برای ٪۲ = ۲ (مربع) و ٪۸/۰ = x (دایره) ، و منحنی های مربوط به برازش مدل وارشنی(خط توپر) و مدل BAC (ستاره) با گاف نواری این نمونه ها .

گاف نواری با افزایش دما در نیمرساناهای گاف مستقیم می باشد. همانطور که در جدول(۶–۱)مشاهده می شود، این پارامتر در نمونه حاوی نیتروژن نسبت به نمونه بدون نیتروژن کوچکتر است و نشان دهنده کاهش وابستگی دمایی در این آلیاژ در اثر حضور N می باشد. مناسبترین مقدار بدست آمده برای دمای دیبای (*β*) در این برازش، ۲۵۰ درجه کلوین می باشـد. با اسـتفاده از مقادیر موجود برای نمونه های مورد مطالعه، می توانیم میزان کاهش گاف نواری این آلیاژها را در بازه دمایی صـفر کلوین تا دمای اتاق تخمین بزنیم. گاف نواری آلیاژ GalnP با افزایش دما در این بازه دمایی، حدود ۷m ۹۰ کاهش می یابد، در حالی که مقدار نواری آلیاژ GalnP با فزایش دما در این بازه دمایی، حدود ۹۰ ها ۹۰ کاهش می یابد، در حالی که مقدار نواری آلیاژ GalnP با فزایش دما در این بازه دمایی، حدود ۹۰ ها ۹۰ کاهش می یابد، در حالی که مقدار مقایس گاف نواری آلیاژ رومی Galon کامون بازه دمایی، حدود ۲۰ مای می شد. به عبارت دیگر کاهش گاف نواری در نمونه حاوی نیتروژن، حدودا ۲۷٪ نمونه بدون نیتروژن است. همان طور که در فصل چهارم دیدیم، مقایسـه جابجایی لبه جذب آلیاژهای Galo و Galos را ثر تغییر دما، نشـان داد که جابجایی لبه جذب مقایسـه جابجایی لبه جذب آلیاژهای Galos با همین مقدار نیتروژن، حدود ۲۰ کاهش می یابد. بنابراین تاثیر حضور نیتروژن روی تغییرات دمایی گاف نواری در ترکیب Galos رمای مای مو می بار می یابد. بنابراین

$$\Delta E_g = bx(1-x) \tag{1-8}$$

با داده های مربوط به کاهش گاف نواری نمونه های مورد مطالعه انجام دادیم، پارامتر خمش را برای نمونه های مورد مطالعه b = ۱۰/۴۶ eV بدست آوردیم. نتایج این برازش در شکل(۶–۶) نشان داده شده است. پارامتر خمش این آلیاژ از پارامتر خمش آلیاژهای GaNAs و GaNP که حدود ۲۶ eV برای/۲ > x ، و ۱۶ eV برای ٪۲ x < می باشد[۱۱]، کوچکتر است، و این موضوع نیز نشان می دهد که تاثیر حضور N روی کاهش گاف نواری آلیاژهای GaINP نسبت به آلیاژهایGaNAs و GaNP، ضعیف تر است.



شکل(۶-۶): نقطه ها میزان کاهش گاف نواری نمونه های مورد مطالعه با افزایش درصد N را نشان می دهند. خط رسم شده از برازش رابطه(۶-۱) با این داده ها بدست آمده است.

کاهش گاف نواری با دما برای نیمرساناهای نیتروژن دار رقیق مانندGaNAS و GaInNAS به خوبی با مدل دافعه نواری قابل توصیف است[۱۲،۱۳]. در واقع استفاده از این مدل روی داده های تجربی، ابزار تجربی ساده ای است که به کمک آن می توان پارامتر جفت شدگی ۲۸۸۸، که بیانگر قدرت برهمکنش بین حالت های وابسته به N و وابسته به ماده میزبان است، را تخمین زد. لذا با در نظر گرفتن فرضیات ذیل، مدل BAC را برای نمونه های مورد مطالعه اعمال نمودیم:

- برای بیان پاشـندگی انرژی وضـعیت های توسـعه یافته نوار رسانش میزبان (GaInP) ه. از معادله وارشنی که بیان کننده تغییرات دمایی گاف نواری می باشد، استفاده نمودیم.
  - انرژی تراز جایگزیده وابسته به E<sub>N</sub> ، N را مانند GaAs و GaInNAs مستقل از دما در نظر گرفتیم.

با در نظر گرفتن این فرضیات، مدل BAC را برای بررسی رفتار دمایی گاف نواری نمونه GaInN0.005P0.995 اعمال نمودیم. بهترین منحنی حاصل از برازش این داده ها با مدل BAC و پارامترهای مربوط به آنها در شکل(۶–۵) نشـــان داده شـــده اســـت. در ایـن مـحـاســبات مـقـادیـرEN= ۲/۱ eV



شکل(۶–۷): نمودارهای حاصل از برازش گاف نواری نمونه های مورد مطالعه GaInN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> و نمونه های گروه هونگ[۵] ، با مدل و پارامترهای مربوط به آن.

و ۲/۱۲ =CMN برای نمونه مورد مطالعه بدست آمد. همانطور که در شـکل(۶-۵) مشـاهده می شـود منحنی حاصل از این برازش، بر منحنی مدل وارشنی کاملا منطبق است. همچنین جهت بررسی تغییرات گاف نواری در دمای اتاق با تغییر درصد۸ ، مدل BAC را روی داده های مربوط به گاف نواری نمونه های مورد مطالعه GalnN<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> و نمونه های گروه هونگ [۵] اعمال نمودیم. بهترین نمودارهای حاصله از برازش این داده ها با مدل BAC و پارامترهای مربوط به آنها در شکل(۶-۷) نشان داده شده است. در این مرحله از محاسبات، با استفاده از نتایج مرحله اول(اعمال مدل BAC روی تغییرات دمایی گاف نواری) ، انرژی تراز M2 را V1 در نظر گرفتیم، و از میانگین گیری بین مقادیر بدست آمده برای پارامترهای جفت شدگی M2، میزان این پارامتر را ۲/۲۶ سکی در ست آوردیم.

پارامترهای BAC مربوط به آلیاژهایGainNP که در مراحل اول و دوم بدســت آوردیم، و پارامترهای BAC مـربـوط بـه آلیـاژهـای GaNAs و GaNP مورد مطـالعـه، کـه در فصــل هـای قبـل بـه آنهـا

| تغیرات گاف نواری نمونه ها | E <sub>N</sub> (eV)         | $C_{MN}$                        |
|---------------------------|-----------------------------|---------------------------------|
| GaInNP با افزایش درصد N   | ۲/۱                         | ۲/۲۶                            |
| GaInNP با افزایش دما      | ۲/۱                         | ۲/۱۲                            |
| GaInNAs با افزایش درصد N* |                             | ١/٧                             |
| GaNAs با افزایش دما       | ۱/۶۲< E <sub>N</sub> < ۱/۶۳ | ۲/۳۶ <c<sub>MN&lt; ۲/۴λ</c<sub> |
| GaNP با افزایش درصد N     | ۲/۳۲                        | ۲/۷                             |

جدول(۶-۲): نتیجه محاسبات پارامترهای BAC در نمونه های مورد مطالعه. سطر ( \* ) مربوط به محاسبات گروه پولیمنی<sup>۱۱۳</sup>[۱۳] می باشد.

اشاره کردیم، در جدول(۶–۲) نشان داده شده است. مقایسه این پارامترها نشان می دهد که پارامتر جفت شدگی مربوط به ترکیبGaInNP، نسبت به سایر سیستمهای نیتروژن دار رقیق کوچکتر است. کوچکتر بودن پارامتر جفت شدگی در آلیاژ GaInNP نشان میدهد که برهم کنش بین حالت های نوار رسانش میزبان (GaINP) هو تراز وابسته به نیتروژن های جایگزیده «Ec این ترکیب نسبت به سیستم های GaNAs و GaInP ضعیف تر است. به همین دلیل تاثیر حضور نیتروژن روی تغییرات دمایی گاف نواری و تغییرات گاف نواری با افزایش درصـد۸، دراین ترکیب در مقایسـه با آلیاژهای GaNAs ضعیف تر میباشد. مشابه موارد گزارش شده در مورد آلیاژهای GaInNAs[۱۳] ، کاهش برهم کنش بین حالتهای ⊾E و تراز ⊾Eدر ترکیبات GaInNP ، ممکن است بدلیل اثر نظم کوتاه برد اتمی در این ترکیبات، به واسطه حضور In ، باشد.

## **۶–۳ بررسی رفتار طیف PL با افزایش شدت تحریک**







شکل (۶-۹): نمودار موقعیت انرژی قله های طیف PL بر حسب شدت تحریک در دمای پایین(مثلث) و دمای۲۴۵درجه کلوین (دایره) م درشـکل(۶–۸)ب نشـان داده شـده اسـت، یک جابجایی قرمز با افزایش شدت تحریک، احتمالا به دلیل گرم شدن نمونه با افزایش توان تحریک، مشاهده میشود.

نمودار وابستگی شدت تحریک طیف PL نمونه های مورد مطالعه GalnN0.01P0.99/GaAs در شکل(۶– ۱۰) نشان داده شده است. در نمونه های حاوی N با افزایش شدت تحریک موقعیت بیشینه قله های طیف PL ،که در دمای پایین اندازه گیری شده اند، به سمت انرژی های بالاتر جابجـــــا

شکل(۶–۱۰): نمودار وابستگی شدت تحریک طیف PL نمونه های مورد مطالعه GaAs/ GaInN0.01P0.99 که الف- در دمای پایین ب- در دمای۲۳۰درجه کلوین اندازه گیری شده اند .



نوسانات لبه نوار رسانش ناشی میشوند، و یا از بازترکیب جفت های الکترون و حفرهٔ جایگزیده در نواحی متفاوت، بایستی به بررسی دینامیک این بازترکیب ها بپردازیم که در ادامه آن را مورد بحث قرار می دهیم.

## ۶–۶ وابستگی زمانی طیف PL

جهت بررسی دینامیک بازتر کیب ها و تعیین مکانیسم حقیقی گذارهای دمای پایین در نمونه های مورد مطالعه GainNP، زمان واهلش طیف PL این نمونه ها را مورد بررسی قرار دادهایم. نمودارهای زمان واهلش نوعی PL (که در بازه زمانی Tnsec ثبت شده اند) نمونه های بدون نیتروژن در شکل(۶–۱۲)الف و نمونه های حاوی ٪۱ نیتروژن، درشکل(۶–۱۲)ب نشان داده شده است. همانطور که در این شکلها مشاهده می شود، زمان واهلش حاوی ٪۱ نیتروژن، درشکل(۶–۱۲)ب نشان داده شده است. همانطور که در این شکلها مشاهده می شونه های حاوی ٪۱ نیتروژن، درشکل(۶–۱۲)ب نشان داده شده است. همانطور که در این شکلها مشاهده می شود، زمان واهلش LP نوعی PL مورد مطالعه غیر نمایی بوده و برای مولفه پرانرژی طیف PL (چنانکه در می شود، زمان واهلش این نمونه های مورد مطالعه غیر نمایی بوده و برای مولفه پرانرژی طیف PL (چنانکه در می شود، زمان واهلش این نمونه های مورد مطالعه غیر نمایی بوده و برای مولفه پرانرژی طیف PL (چنانکه در کی شول های قبل راجع به علت آن توضیح داده شد)کاهش می یابد. زمان واهلش این نمونه های بدون نیتروژن کرم کار ۲٫۰ ۲) قابل برازش است. نتیجه این برازش نشان می دهد که زمان واهلش مولفه آرام نمونه های بدون نیتروژن در شره ۲٫۰ ۲) می شود موال مولفه آرام نمونه های موره موال موره موال مورد موال موره موال مولفه آرام نمونه ها توسط رابطه (۵–



شکل(۶-۱۲): نمودارهای زمان واهلش PL نمونه هایی که الف- حاوی نیتروژن نیستند. ب- حاوی ٪۱ نیتروژن اند.

و زمان واهلش مولفه آرام ( <sub>slow</sub> ) نمونه های حاوی نیتروژن درمحدوده nsec ۳۳ معتیر می کند. همچنین آهنگ بازترکیب گذارهای نوری در بخش کم انرژی طیف PL (انرژی های گسیلی قبل از قله PL مثلا (۱/۶۳۸e۷)، که به بازترکیب حاملهایی که در عمیق ترین پتانسیل های جایگزیده بدام افتاده اند مربوط می شود، کمتر است. اندازه گیریهای زمان واهلش انجام شده در بازه زمانی ۱۰µsec نشان می دهندکه زمان واهلش مولفه آرام حتی به حدود ۲۲۵۲۰ نیز میرسد.

جهت مقایســه بهتر، نمودارهای زمان واهلش PL نمونهٔ بدون نیتروژن و نمونهٔ حاوی نیتروژن برای انرژی های گسیلی نزدیک به قله طیف PL، در شکل(۶–۱۳) نشان داده شده است. طولانی شدن زمان واهلش مولفه آرام PL، که در سـاختارهای بدون نیتروژن مشـاهده نمی شـود، ناشـی از حضـور اتمهای N در ترکیب آلیاژهای نمونه های مورد مطالعه GaInNP میباشد.

در آلیاژهای بدون نیتروژن GainP زمان واهلش آرام کمتر ازحدود ۲ nsec می باشد، که این موضوع پدیده ای عمومی درمورد بازترکیب های تابشی اکسیتونی در نیمرساناهای گاف مستقیم می باشد.

نتایج اندازه گیری های زمان واهلش نمونه های حاوی نیتروژن گواهی بر این موضوع است که احتمالا فرآیند غالب بازترکیب تابشی در طیفهای LT-PL نمونه های مورد مطالعه ناشی از بازترکیب



شکل(۶–۱۳): نمودارهای زمان واهلش PL نمونه های مورد مطالعه بدون نیتروژن(دایره)و شامل یک درصد نیتروژن (مربع) که در انرژی های نزدیک به قله طیف PL اندازه گیری شده اند.

جفت های الکترون و حفرهٔ جایگزیدهٔ در نواحی متفاوت نوار رسانش و ظرفیت می باشد. زیرا بیشینه طول عمر PL برای اکسیتونهای جایگزیده در یک نیمرسانای گاف مستقیم، نظیر GaNAs یا GalnNAs از مرتبه چند نانوثانیه بیشتر نمی باشد [۱۴،۱۵]. البته مؤلفه سریع زمان واهلش PL در نمونه های مورد مطالعه GalnN نیز، احتمالا ناشی از این نوع بازترکیب، یعنی بازترکیب اکسیتونهای جایگزیده است.ولی به علت ضعیف شدن همپوشانی توابع موج جفت های الکترون و حفرهٔ جایگزیده در نقاط مختلف نوار رسانش و ظرفیت، انتظار می رود که آهنگ بازترکیب آنها به نحو قابل ملاحظه ای کند شود. مقایسه این نتایج با سیستم های GanAs و GalnNAs که ترکیبات نیمرساناهای مستقیم هستند، نشان می دهد که این نوع مکانیسم بازترکیب تابشی در آلیاژهای نیتروژن دار رقیق گاف مستقیم پدیده ای غیر معمول بوده و مختص این ترکیب است.

مکانیسم طیف PL دمای پایین، نشان دهنده تغییرات ایجاد شده در ساختار نواری آلیاژ در اثر حضور نیتروژن می باشد. حالت های نوار رسانش آلیاژ بیشترین تاثیر را از حضور نیتروژن می پذیرند. به همین دلیل توزیع غیر یکنواخت نیتروژن در ساختمان آلیاژ، عامل اصلی ایجاد نوسانات پتانسیل در لبه نوار رسانش می باشد، در حالی که نوار ظرفیت عملا مسطح و بدون نوسان باقی می ماند. در نتیجه الکترونهای تحریک شده توسط فوتون ها، جایگزیده شده، در حالی که حفره های تحریک شده توسط فوتون ها، متحرک باقی می مانند، و جفت های الکترون و حفرهٔ جایگزیده در نقاط مختلف نوار رسانش و ظرفیت، را تشکیل دهند. افزایش قابل توجه طول عمر PL در آلیاژهای GaInNP گواه دیگری برای این نتیجه گیری است که مکانیسم جایگزیدگی در این ماده به جدایی مکانی حاملهای تحریک شده منجر می شود.

# منابع

## منابع فصل ۱

[۱] کیتل. چارلز، آشـنایی با فیزیک حالت جامد.ترجمه پور قاضی. اعظم ، صـفا. مهدی ، عمیقیان. جمشـید، مرکز نشـر دانشگاهی،چاپ سوم،۱۳۸۰. [Y] J. Singh , (1995) , Semiconductor Optoelectronics: Physics and Technology (Electronics and Vlsi Circuits), McGraw-Hill Companies.

[r] N.W.Ashcroft, D.N. Mermin,(1976), *Solid State Physics*. Saunders College Publishers.

 $[\ensuremath{{}^{\psi}}]$  P.Bhattacharya , A. Arbor, (1996) . Semiconductor Optoelectronic Devices" . Prentice Hall; 2 edition.

[a] C.M.Wolfe, N. Holonyak and G.E.Stillman, (1989), *Physical Properties of Semiconductors*, Prentice Hall, New York.

#### منابع فصل ۲

[1] I. A.Buyanova , W. M.Chen,.(2004). *Physics and application of Dilute Nitrids*. Publishig by Taylor & Francis.

[Y] W. Shan, W. Walukiewicz, and J. W. Ager III, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson, and S. R. Kurtz. (1999) *.Phys. Rev. Lett.* 82(6) .1221(4).

[<sup>r</sup>] P. R. C. Kent and A. Zunger. (2001). *Phys. Rev. B* 64. 115208.

[<sup>†</sup>] S.H. Wei AND Zunger. (1991). Phys. Rev.B 43,1662-7.

[a] L. Bellaiche, S.-H. Wei, and Alex Zunger . (1996). *Phys. Rev .B* 54(24), 17568(9).

[۶] L. Bellaiche.S.-H. Wei, and Alex Zunger. (1997) Appl. Phys. Lett. 70 (26).

[Y] M.S.Tsang, J.N.Wang, W.K.Ge,G.H.Li,Z.L.Fang, H.X. Han, L.H. Li, Z. Pan, (2001). *Appl. Phys. Lett.* 78, 3595-7.

[A] D.G.Thomas , J. J.Hopfield, C.J. Frosch, (1965), *Phys. Rev. Lett* .15 , 857-60.

[9] I. A. Buyanov, M. Izadifard, and W. M. Chen. H. P. Xin and C. W. Tu. (2004). *Phys . Rev . B* .69.201303.

[1.] P.Bhattacharya , A. Arbor, (1996) . *Semiconductor Optoelectronic Devices* . Prentice Hall; 2 edition.

[11] M.Reason, H. A. McKay, W.Ye, S. Hanson, and R. S. Goldman, V. Rotberg. (2004), *Appl. Phys. Lett* 85,1692-4.

[۱۲] کیتل. چارلز، آشـنایی با فیزیک حالت جامد.ترجمه پور قاضـی. اعظم ، صفا. مهدی ، عمیقیان. جمشید، مرکز نشر دانشگاهی،چاپ سوم،۱۳۸۰.

[17] S. K. Tewksbury ., Semiconductor Materials Microelectronic Systems Research Center Dept. of Electrical and Computer Engineering West Virginia University Morgantown, WV 26506 (304)293-6371.

[14] C.M.Wolfe, N. Holonyak and G.E.Stillman, (1989), *Physical Properties of Semiconductors*, Prentice Hall, New York.

[16] C. V. Reddy, R. E. Martinez II, and V. Narayanamurti. H. P. Xin and C. W. Tu. (2002). *Phys. Rev. B* 66, 235313.

منابع فصل ٣

[1] P.Bhattacharya , A. Arbor, (1996) . *Semiconductor Optoelectronic Devices* . Prentice Hall; 2 edition.

[Y] J. Singh , (1995) , *Semiconductor Optoelectronics: Physics and Technology (Electronics and Vlsi Circuits)*, McGraw-Hill Companies.

منابع فصل ۴

- [1] I.A. Buyanova, W.M. Chen, C.W. Tu, (2003), Solid-State Electronics 47, 467-5.
- [Y] X. Liu, M.E. Piostol, L. Samuleson, (1990). Appl. Phys. Lett .56,1451-3.
- [<sup>r</sup>] X .Liu , M .E .Piostol , L .Samuleson , (1990), *Phys . Rev . B* 42 ,7504 -12.
- [\*] K. Madder and A. Zunger, (1995), *Phys. Rev. B* 51,10462 –76.
- [a] E.Cohen , M. D.Sturge , N.O.Lipari, M.Altarelli, A. Badereschi , (1975), *Phys. Rev.Lett* .35, 1591 –
  4.
- [*P*] T.Makimoto, H. Saito, T. Nishida, N. Kobayash, (1997), *Appl. Phys. Lett.*70, 2984 6.

[Y] S. Ben Bouzid, F. Bousbih, R. Chtourou, J.C. Harmand, P. Voisin. (2004) *Materials Science & Engineering B* 112, 64–8.

- [A] T. Makimoto, H. Saito, N. Kobayashi, Jpn.(1997). J. Appl. Phys., Part 1, 361694.
- [9] Y. Zhang, A. Mascarenhas, J.F. Geisz, H.P. Xin, C.W. Tu, (2001) *Phys. Rev. B* 63, 85205.
- [1.] P.R.C. Kent, A. Zunger, (2001), Phys. Rev. Lett. 86 2613.
- [11] Y. Zhang, B. Fluegel, A.Mascarenhas, H. P. Xin, C. W. Tu, (2000). *Phys. Rev. B* 62, 4493-500.

[17] I.A. Buyanova, W.M. Chen, G. Pozina, J.P. Bergman, B.Monemar, H.P. Xin, et al. (1999). *Appl Phys Lett* 75(4), 501–3.

[1<sup>γ</sup>] P.J.Klar, H. Gr€uning, W. Heimbrodt, J.Koch, F. H€ohnsdorf, W. Stolz, (2000). *N. Appl Phys Lett* 76(23), 3439–41.

 [1<sup>\*</sup>] A. Polimeni, M. Cappizzi, M. Geddo, M. Fischer, M.Reinhardt, A. Forchel, (2000). *Appl Phys Lett* 77(18), 2870–2.

[10] I.A. Buyanova, W.M. Chen, B. Monemar, H.P. Xin, C.W. Tu. (1999). *Appl Phys Lett*75(24), 3781–
 3.

[19] I.A. Buyanova, G. Pozina, P.N. Hai, N.Q. Thinh, J.P. Bergman, W.M.Chen, et al. (2000). *Appl Phys Lett77*, (15), 2325–7.

[1Y] I.A. Buyanova, W.M.Chen, G. Pozina , P.N. Hai, N.Q. Thinh, E.M.Goldys , H.P. Xin, C.W. Tu, (2000), 0-7803-6698- *IEEE*.

[1A] H. Dumont ,L. Auvray, Y. Monteil, F. Saidi, F. Hassen, H. Maaref, (2003), *Optical Materials* 24, 303–8.

[19] H.Gruning, L. Chen, T. Hartmann, P.J.Klar, et al, (1999). *Phys. Stat. Solidi B* 215, 39-45.

[Y•] I.A. Buyanova, W.M.Chen and C. W. Tu. (2002). Semicond. Sci. Technol. 17 815–822

[Y1] S. Mazzucato, R.J. Potter, A. Erol, N. Balkan, P.R. Chalker, T.B. Joyce, T.J.Bullough, X.Marie, H.
 Carr2ere, E. Bedel, G. Lacoste, A. Arnoult, C. Fontaine (2003). *Physica E 17*, 242 – 4.

[YY] N.V. Kryzhanovskaya. (2002). Low dimension seminar loffe Institute.

[ΥΥ] K. Uesugi, I. Suemune, T. Hasegawa, T.Akutagawa, and T. Nakamura. (2000), *Appl. Phys. Lett* 76, 10,1285.

[YF] H.F. Liu, N. Xiang, S.J. Chuaa, S. Tripathy. (2006). Journal of Crystal Growth 288,44–48.

[Ya] T. Ahlgren, E. Vainonen-Ahlgren, J. Likonen, W. Li, M. Pessa, (2002). Appl.Phys. Lett. 80, 2314.

[Υ?] W.J. Fan, S.F. Yoon, T.K. Ng, S.Z. Wang, W.K. Loke, R. Liu, A.Wee, (2002) *Appl. Phys. Lett.* 80 4136.

[YY] W. Li, M. Pessa, J. Likonen, (2001) Appl. Phys. Lett. 78, 2864.

[YA] Z.L. Liu, P.P. Chen, T.X. Li, C.J. Xu, W. Lu, F.Z. Wang, Z.H. Chen. (2006). *Journal of Luminescence* 119–120, **546–50**.

[Y9] D. Sentosa, X. Tang, Z. Yin, S. J Chu, (2007). Journal of Crystal Growth 307, 229–34.

[r·] W.K. Cheah, W.J. Fan, S.F. Yoon, T.K. Ng, W.K. Loke, D.H.Zhang, T. Mei, R.Liu, A.T.S. Wee, (2005). Journal of Crystal Growth 275, 440.

["1] J. Miguel-Sanchez, A. Gusman, E. Munoz, (2004) .Appl. Phys. Lett. 85,11.

[<sup>rr</sup>] S.B. Zhang, S.H. Wei, (2001). *Physica B* 839,308–310.

[TT] S. Francoeur, G. Sivaraman, Y. Qiu, S. Nikishin, H. Temkin, (1996), Appl. Phys. Lett. 72, 1857.

["<sup>\*</sup>] W.K. Loke, S.F. Yoon, S.Z. Wang, T.K. Ng, W.J. Fan, (2002) J. Appl. Phys. 91, 4900.

[ra] G. Mussler, J.M. Chauveau, A. Trampert, M. Ramsteiner, L. Da<sup>"</sup> weritz, K.H. Ploog, J.(2004). *Crystal Growth* 267, 60.

[TF] J.Wu, W. Shan and W.W.alukiewicz, (2002) Semicond. Sci. Technol. 17, 860–869.

[<sup>rv</sup>] R. Hill and D. Richardson (1971) J. Phys. C 4, L289.

[TA] J. A. Van Vechten and T. K. Bergstresser (1970) Phys. Rev. 3351.

[٣٩] W. Shan, K.M. Yu, W. Walukiewicz,J. Wu, J.W. Ager III ,E.E. Haller, (2003),*Lawrence Berkeley National Laboratory*(University of California)LBNL-54550.

[<sup>*F*</sup>·] R. Kudrawiec, G. Sek, J. Misiewicz, L.H. Li, J.C. Harmand. (2004). *Solid State Communications 129*. **353–7**.

[<sup>\*</sup>1] I. Suemune, K. Uesugi, W. Walukiewicz, (2000) . Appl. Phys. Lett. 77, 3021.

[<sup>γ</sup><sup>γ</sup>] R. Chtourou, F. Bousbih, S. Ben Bouzid, F.F. Charfi, J.C.Harmand, G. Ungaro, L. Largeau, (2002).*Appl. Phys. Lett.* 80, 2075.

[<sup>f</sup><sup>r</sup>] A. Polimeni, M. Capizzi, M. Geddo, M. Fisher, M. Reinhardt, A. Forchel, (2001) *Phys. Rev. B* 63, 195320.

#### منابع فصل ۵

- [1] D. G. Thomas, J. J. Hopfield, and C. J. Frosch, (1965), *Phys. Rev. Lett.* 15, 857.
- [Y] D. G. Thomas and J. J. Hopfield, (1966). *Phys. Rev.* 150, 680.
- [r] H. P. Hjalmarson, P. Vogl, D. J. Wolford, and J. D. Dow, (1980) .*Phys. Rev. Lett.44*, 810 .
- [<sup>\*</sup>] R. A. Falkner and P. J. Dean, (1970). J. Lumin. 12, 552.

[ $\Delta$ ] H.Yaguchi, S.Miyoshi., G. Biwa, M. Kibune, K.Onabe, Y.Shiraki, R. Ito, (1997). *J.Crystal.Growth*, *170*, **353**.

- [*P*] R. A. Logan, H. G. White, and W. Wiegman, (1968). *Appl. Phys. Lett.* 13, 139.
- [Y] W. O. Groves, A. H. Herzog, and M. G. Craford, (1971), Appl. Phys. Lett. 19,184.
- [A] H. P. Xin and C. W. Tu. (2000), Appl. Phys. Lett. 77.

[9] L. Bellaiche, S. H. Wei, and A. Zunger, (1997). *Phys. Rev. B* 56, 10233.

[1.] H. P. Xin, C. W. Tu, Y. Zhang, and A. Mascarenhas, (2000), *Appl.Phys.Lett*76,1267.

[11] J.N. Baillargen, K.Y. Chen, G.E. Holfl, P.J. Pearah, K.C. Hsieh, (1992), Appl. Phys. Lett. 60, 2540.

[11] I. A. Buyanova, G. Yu. Rudko, and W. M. Chen . (2002), Appl. Phys. Lett. 80.

[17] W. Shan, W. Walukiewicz, K. M. Yu, J. Wu, J. W. Ager III, E. E. Haller, H.P. Xin, and C. W. Tu, (2000). *Appl. Phys. Lett.* 76, 3251.

[1<sup>\*</sup>] I.A. Buyanova, G. Pozina, J.P. Bergan, W.M. Chen, H.P. Xin, C.W. Tu , (2002) .*Appl. Phys. Lett*, *81(1)*, **52**.

[16] G.Yu. Rudko, I.A. Buyanova, W.M. Chen, H.P. Xin, C.W. Tu . (2003), *Solid-State Electronics* 47,493.

[19] K. Onabe, (1997), Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 449, 23.

[1Y] Y. Zhang, B. Fluegel, A. Mascarenhas, H. P. Xin, and C. W. Tu, (2000), *Phys. Rev. B* 62, 4493.

[1A] W. Shan, W. Walukiewicz, J. W. Ager III, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson, and S. R. Kurtz, (1999), *Phys. Rev. Lett.*82, 1221.

[19] J. Wu, W. Walukiewicz, K. M. Yu, J. W. Ager III, E. E. Haller, Y.G. Hong, H. P. Xin, and C. W. Tu, (2002). *Phys. Rev. B* 65, 241303.

[Y•] P. R. C. Kent and Alex Zunger, (2001), Phys. Rev. Lett. 86, 2613.

[Y1] P. R. C. Kent and Alex Zunger, (2001). Phys. Rev. B 64, 115208.

[YY] J. R. Chelikowski and M. L. Cohen, (1981). Phys. Rev. B 14.

[YT] D. S. Kyser and V. Rehn, (1978), Phys. Rev. Lett. 40, 1038.

[Y<sup>¢</sup>] D. Long, (1968), Energy Bands in Semiconductors (Wiley, New York,) 110.

[۲Δ] C. V. Reddy, R. E. Martinez II, and V. Narayanamurti. H. P. Xin and C. W. Tu. (2002), *Phys. Rev. B* 66, 235313.

[<sup>γ</sup>*β*] G. Yu. Rudko, I. A. Buyanova, W. M. Chen, H. P. Xin, and C. W.Tu, (2002).*Appl. Phys. Lett.* 81, 3984.

[YY] P. J. Wiesner, R. A. Street, and H. D. Wolf, (1975), *Phys. Rev. Lett.* 35,1366.

[YA] P. J. Dean, G. Kaminsky, and R. B. Zetterstrom ,(1967), J. Appl. Phys. 38,3551.

[۲۹] G.I. Bir, and G.E. Pikus (1974). *'Symmetry and strain-induced effects in semiconductors'* (Wiley, New York).

[ $r \cdot$ ] I.A. Buyanova, M. Izadifard, W.M. Chen, H.P. Xin and C.W. Tu. (2004), *IEE Proc.-Optoelectron.*, *151*, **389**.

[<sup>m</sup>] I. A. Buyanova, M. Izadifard, and W. M. Chen H. P. Xin and C. W. Tu, (2004) Phys. Rev. B 69, 1.

["T] J.W. C.Ford & Myles, (1986). Phys. Rev. B 34, 927.

[<sup>γγ</sup>] Utsumi, A., Yonezu, H., Furukawa, Y., Momose, K., and Kuroki, K.:'Increase in luminescence efficiency of GaPN layers by thermal annealing', (2003) *, Phys. Status. Solidi C 7*, 2741.

[<sup>*Υ*</sup><sup>*Υ*</sup>] Kash, J.A., Collet, J.H., Wolford, D.J., and Thompson, (1983), *J'*, *Phys. Rev. B,Condens. Matter* 27, **2294**.

[٣۵] P.Bhattacharya , A. Arbor, (1996) . *Semiconductor Optoelectronic Devices.* Prentice Hall; 2 edition.

[*Υγ*] Wolfe, C.M., Holonyak, N., and Stillman, G.E. (1989), *Physical Properties of Semiconductors,* Prentice Hall, New York,.

["Y] D.G .Thomson and J.j. Hopfield, (1966). Phy . Rev. 150,680.

منابع فصل ۶

[1] I. A. Buyanova ,W. M. Chen and B. Monemar, (2001) *Mater. Res. Soc. Internet .Nitride Semiconduct.Res. 6*, 002.

[Y] I. A. Buyanova and W. M. Chen. (2004). The book "Physics and Applications of Dilute Nitrides", edited by (Taylor & Francis, New York.

["] H. Y. Yow, P. A. Houston, C.C. Button, T. W. Lee and S. J. Roberts, (1994) J. Appl. Phys. 76, 8135.

[<sup>\*</sup>] R. J. Welty , Y. G. Hong , H. P. Xin , K. Mochizuki , C. W.Tu and P. M. Asbeck, Proc. (2000) *IEEE/Cornell Conf. on High Performance Devices (Piscataway, USA) (Piscataway, NJ: IEEE)*, *p.33(200).* 

[a] Y. G. Hong, A. Nishikawa, and C. W. Tu, (2003), Appl. Phys. Lett. 83, 5446.

[*P*] Y. K. Su, C. H. Wu, S. H. Hsu, S. J. Chang, W. C. Chen, Y. S. Huang, and H. P. Hsu ,(2004), *Appl. Phys. Lett.* 84, 1299.

[Y] Y. K. Su, C. H. Wu, Y. S. Huang, H. P. Hsu, W. C. Chen, S. H. Hsu, and S. J. Chang, (2004), J. Cryst. Growth 264, 357.

[∧]-I. A. Buyanova, W. M. Chen, G. Pozina, J. P. Bergman, B. Monemar, H. P. Xin, and C. W. Tu, (1999), *Appl. Phys. Lett. 75*, **501**.

[9] Y. P. Varshni, (1967), *Physica . Amsterdam.* 34, 149.

[1.] H.P.Hsu, Y. S. Huang, C.H.Wu, Y. K. Su, F. S. Juang, Y.G.Hong and

C.W.Tu ,(2004), J. Phys.: Condens. Matter 16. S3245-6.

[11] J.Toivonen, T.Hakkarainen, M.Sopanenand H.Lipsanen. (2000) ), J. Cryst. Growth 221, 456.

- [17] I. Suemune and K. UesugiW. Walukiewicz , (2000), Appl. Phys. Lett. 77 (19). ,3021.
- [17] A. Polimeni and M. CapizziM. Geddo. M. Fischer, M. Reinhardt, and A. Forchel
- (2001) . Phys. Rev. B. 63, 195320.
- [14] I. A. Buyanova, W. M. Chen, G. Pozina, J. P. Bergman, B. Monemar, H. P. Xin and C. W. Tu, (1999) , *Appl. Phys. Lett.* 75, 501.
- [10] R. A. Mair, J. Y. Lin, and H. X. Jiang, E. D. Jones, A.A. Allerman, and S. R. Kurtz, (2000), *Appl. Phys. Lett.* 76, 188.

## مقالات مستخرج از پایان نامه

## قسمتی از نتایج این پایان نامه در غالب یک مقاله تحت عنوان:

"بررسی خواص اپتیکی ترکیب نیمرسانای GaNP پس از انجام عملیات حرارتی"

درکنفرانس سالانه فیزیک ایران شهریور ماه ۱۳۸۷دانشگاه کاشان برای ارائه به صورت پوستر

پذیرفته شده و ارائه گردیده است.