بررسی سطوح انرژی عمقی و سطحی در نانوساختارهای اکسیدروی

نیوشا باقری، محمدحسین مجلس آرا

دانشگاه خوارزمی، دانشکده فیزیک،آزمایشگاه نانوفوتونیک

چکیده

در این تحقیق به توضیح و بررسی مفاهیم کلی سطوح انرژی سطحی و عمقی به عنوان یکی از عمده مشکلاتی که موجب عدم شرکت صحیح پذیرنده‌ها در خواص الکتریکی دلخواه در شبکه نیم‌رساناهای دارای گاف انرژی پهن و به طور مشخص اکسیدروی نوع مثبت می‌گردد، پرداخته و سپس نگاهی بر سطوح انرژی هریک از نقصان‌های ذاتی شبکه اکسیدروی خواهد شد. به نظر می‌رسد دقت در جایگاه قرارگیری تراز انرژی دوپنت‌های انتخابی می‌تواند سهم بسزایی در بهینه سازی کیفیت نانوساختارهای اکسیدروی داشته باشد.

واژه‌های کلیدی: *سطوح انرژی، اکسیدروی نوع مثبت، نواقص سطحی و عمقی*

Majlesara@gmail.com

۱- مقدمه

اکسیدروی نیم‌رسانایی با گاف انرژی مستقیم و پهن (3.37eV) است که به سبب انرژی اکسایتونیک بالا (60meV) و همچنین خواصی چون غیرسمی بودن، فراوانی و قیمت کم، گستره وسیع زیرلایه‌های مناسب و ...، گزینه بسیار مناسبی برای استفاده در ابزار الکترواپتیکی محسوب می‌شود. اکسیدروی نیم‌رسانایی ذاتا نوع منفی است. اما برای ساخت ابزار الکترواپتیکی همگن از آن، بدست آوردن توانایی ساخت اکسیدروی نوع مثبت نیز ضروری می‌نماید. ولی ساخت اکسیدروی نوع مثبت، مانند اکثر نیم‌رساناهای با گاف انرژی پهن با مشکلاتی مواجه است که همچنان حل‌نشده باقی مانده‌اند. در این مقاله پس از بیان اجمالی مشکلات ساخت اکسیدروی نوع مثبت، به بررسی مفصل سطوح انرژی عمیق پذیرنده‌ها در آن ، به عنوان مشکل اصلی، خواهیم پرداخت[1,2].

۲- مشکلات پیش‌رو در ساخت نانوساختارهای اکسیدروی نوع مثبت

دستیابی به اکسیدروی نوع مثبت، مانند اکثر نیم‌رساناهای با گاف انرژی بزرگ، بامشکلاتی مواجه است که در زیر به اختصار به آن‌ها می‌پردازیم:

- انرژی تشکیل پذیرنده‌ها در اکسیدروی زیاد است.
- پایداری پذیرنده‌هایی که وارد شبکه می‌شوند، کم است.
- انحلال‌پذیری عناصر مناسب برای ناخالص‌سازی نوع مثبت، در اکسید روی کم است.
- سطح انرژی پذیرنده‌ها در سطح عمیق قرار دارد که برای ما مطلوب نیست.

از چهار مورد ذکر شده در بالا، سه گزینه اول تقریبا واضح‌اند. اما به واسطه مفهوم کلیدی و تاثیرگذار سطوح انرژی سطحی و عمقی که در گزینه چهارم مستتر است، به شرح بنیادی تری در این باب خواهیم پرداخت[2-4].

۳- سطوح انرژی سطحی و عمقی شبکه

وقتی صحبت از ساختار شبکه می‌شود یکی از رایج‌ترین و مهم‌ترین بحث‌ها، سطح انرژی پیوند هر یک از اجزا خواهد بود. که شامل سطح انرژی نوار ظرفیت، رسانش، گاف انرژی ماده میزبان و سطح انرژی هر یک از نواقص موجود در شبکه است. حال بسته به اینکه سطح انرژی نواقص درون شبکه چقدر از لبه‌های گاف انرژی فاصله داشته باشد آن نواقص را از نظر سطح انرژی دسته‌بندی می‌نمایند: اگر سطوح انرژی نواقص از باند رسانش و یا ظرفیت فاصله‌ای کمتر از 3KT داشته باشد آن نواقص را نواقص با سطح انرژی سطحی می‌نامند، که عدد3KT، نمایانگر ۳ درجه آزادی حرکتی ناشی از انرژی گرمایی ماده است و حاکی از بستگی شدید نیم‌رساناها به دما می‌باشد. به عبارتی هر چه سطح انرژی نواقص به سطوح انرژی نوار رسانش و ظرفیت نزدیک‌تر باشد، این معنی را می‌دهد که ناخالصی و یا نقص وارده، بهتر در شبکه جای گرفته و پایدارتر خواهد ماند. اما اگر سطح انرژی نقص مورد بررسی از لبه‌های گاف انرژی، فاصله‌ای بیش از 3KT داشته باشد، نقص با سطح انرژی عمیق محسوب شده و این معنی را می‌دهد که عنصر و یا عناصر مربوطه قادر به ایفای نقش مستقیم در رسانندگی حامل‌های آزاد در شبکه نیستند.

علاوه بر آنچه که بیان شد مشکل دیگری که نواقص با سطح انرژی عمیق ایجاد می‌کنند این است که، سطح انرژی واقع در وسط گاف انرژی، برای الکترون‌ها و حفره‌های شناور و آزاد در ماده به عنوان یک تله عمل کرده و باعث گیراندازی الکترون و حفره درون خود می‌شود یعنی سهم بسزایی در افزایش بازترکیب غیرمستقیم حرارتی و از بین بردن حامل‌های آزاد بار نیز خواهند داشت، که خود منجر به کاهش غلظت حامل‌های بار و کم کردن رسانندگی الکتریکی ماده میزبان می‌شود [5-12].

۴- بررسی سطوح انرژی نواقص ذاتی شبکه اکسیدروی

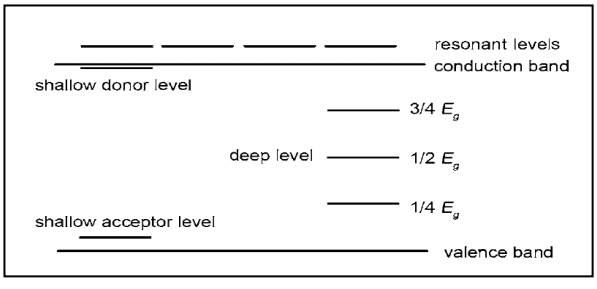
به طور کلی، نواقص ذاتی یک شبکه شامل یکی از حالات زیر است:

تهی‌جاها(vacancies): عدم وجود یک اتم یا یون، در جایی از شبکه که به صورت ایده‌آل انتظار می‌رود وجود داشته باشد.

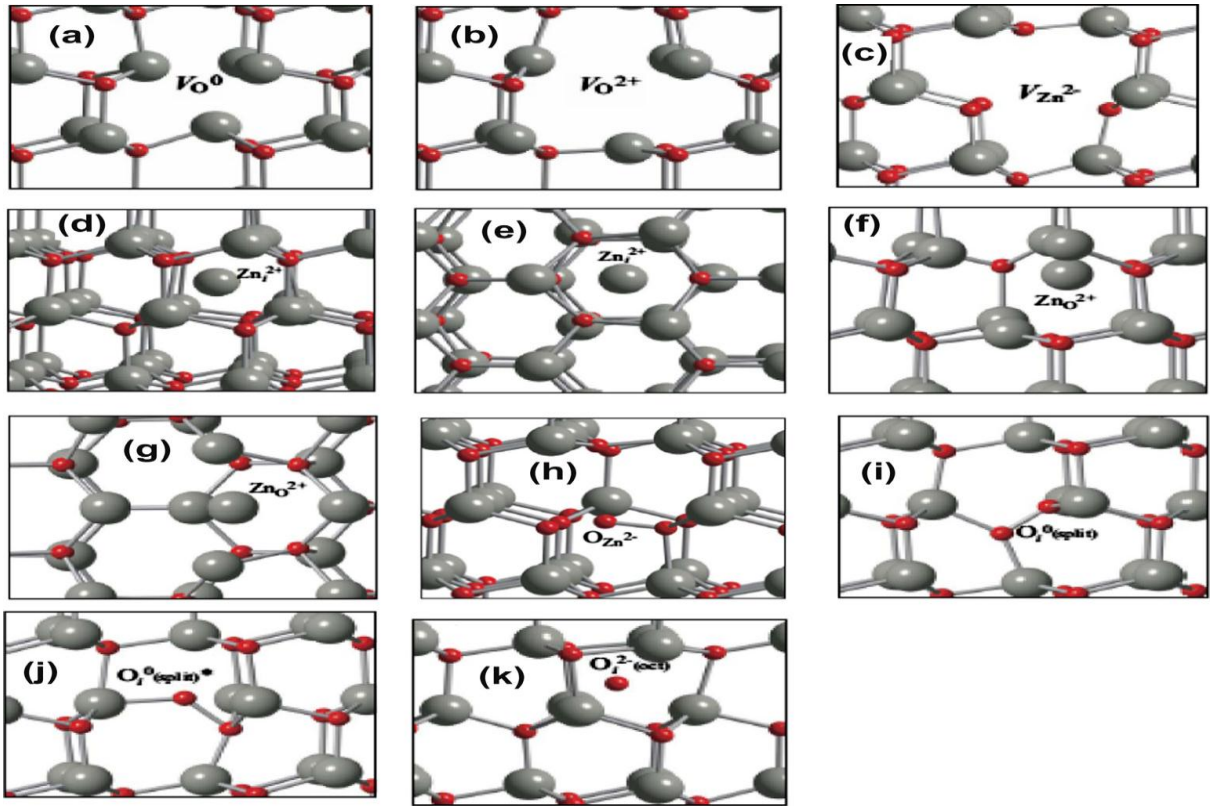
اتم‌های بینابینی(interstitial): اتم یا یون‌هایی که با تمام یون‌های مجاور خود پیوند تشکیل نداده و به عبارتی در شبکه سرگردانند.

اتم‌ها یا یون‌های نابجا(antisites): اتم یا یون‌هایی که در جایی غیر از آنچه انتظار می‌رود، تشکیل پیوند داده و مستقر شده‌اند[2,3,8].

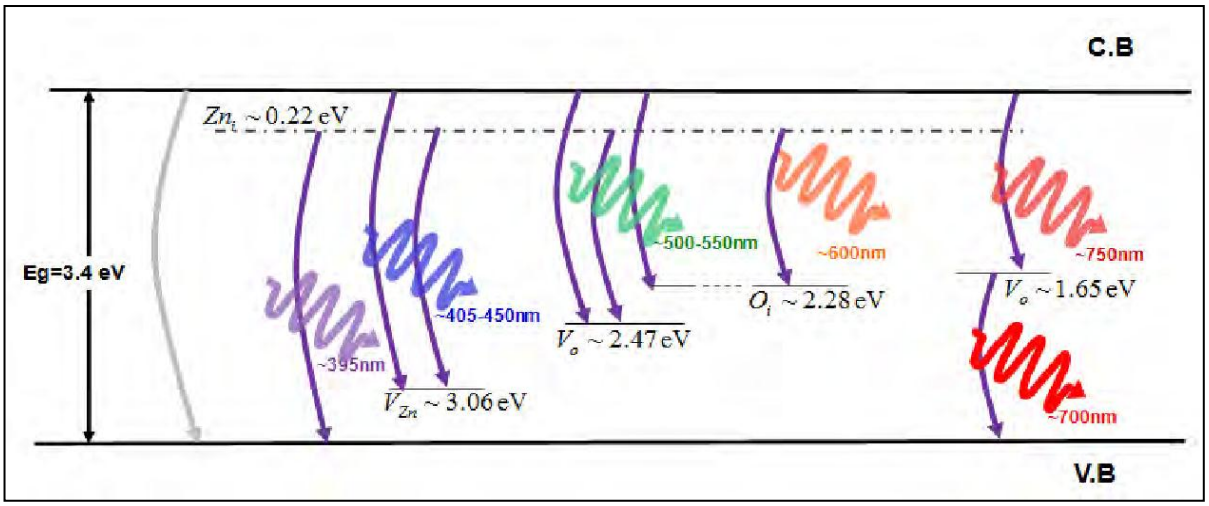
نقایص ذاتی اکسیدروی نیز از این سه دسته کلی، خارج نیستند (شکل ۲).



شکل ۱) نمایی شماتیک از سطوح انرژی سطحی و عمقی[13]



شکل ۲) شبیه سازی نقصان های ذاتی شبکه اکسید روی[2].



شکل ۳) سطوح انرژی نواقص ذاتی اکسیدروی[8].

رایج‌ترین روش تشخیص سطوح انرژی نواقص شبکه، تحلیل طیف فوتولومینسانس آن است. سطوحی که نواقص ذاتی اکسیدروی در بین گاف انرژی اشغال می‌نمایند مطابق آنچه در بخش قبلی ذکر گردید آنها را به عنوان نواقص سطحی و یا عمقی معرفی می‌نماید(شکل ۳). تهی‌جاهای اکسیژن یکبار یونیزه را عمدتا مسئول گسیل سبز در طیف فوتولومینسانس می‌دانند. طیف قرمز نیز به تهی‌جاهای اکسیژن دوبار یونیزه نسبت داده می‌شود. گسیل آبی رنگ به تهی‌جاهای روی مربوط است. همچنین می‌توان آن را به ترکیب روی‌های بین شبکه‌ای با تهی‌جاهای روی نیز نسبت داد. به طور کلی روی‌های بین شبکه‌ای در فاصله ۰,۲۲ الکترون‌ولت، زیر باند رسانش واقع شده‌اند و بسته به این که با کدام یک از نواقص عمقی مثل تهی‌جاهای اکسیژن، روی و اکسیژن بین شبکه‌ای بازترکیب گردند، می‌توانند مسئول تولید تابش سبز، قرمز و آبی باشند.اکسیژن‌های بین شبکه‌ای نیز در فاصله ۲,۲۸ الکترون‌ولت در زیر نوار رسانش واقع شده و مسئول تابش نارنجی-قرمز هستند. همچنین می‌توان تابش زرد را نیز به آنها نسبت داد. به طور کلی هنوز هیچ اتفاق نظری بر منشاء تابش‌های مختلف در طیف فوتولومینسانس وجود ندارد، اما از این میان تابش سبز رنگ جدال برانگیزترین نظریه‌ها را به خود اختصاص داده است[8].

۵- نتیجه‌گیری

با توجه به بررسی‌های انجام شده، به نظر می‌رسد برای تولید اکسیدروی نوع مثبت پایدار و تکرارپذیر، دقت در سطح انرژی و قرارگیری ناخالصی‌های انتخاب‌شده از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. به طوری که باید سعی نمود جایگاه سطح انرژی قرارگیری دوپنت انتخابی برای پذیرنده‌ها کمتر از 3KT بالاتر از نوار ظرفیت واقع شود تا قرارگیری در شبکه به حد مطلوب باشد و پایداری محصول نهایی را تضمین نماید.

۶- منابع:

1. F.Lu, W.Cai, Y.Zhang, ZnO Hierarchical Micro/Nanoarchitectures: Solvothermal Synthesis and Structurally Enhanced Photocatalytic Performance , advanced functional materials 18 (2009) 1047–1056

2. J.C. Fan,K.M. Sreekanth , Z. Xie d, S.L. Chang e, K.V. Rao, p-Type ZnO materials: Theory, growth, properties and devices, Progress in Materials Science 58 (2013) 874–985

3. C. H. Park, S. B. Zhang, Su-Huai Wei, Origin of p-type doping difficulty in ZnO: The impurity perspective, PHYSICAL REVIEW B 66 (2002) 0732021-3

4. ZnO Nanostructures for optoelectronics: material properties & device applications

5. J. C. Simpson, J. F. Cordaro, Characterization of deep levels in zinc oxide, J. Appl. Phys. 63(1988)1781-1783

6. F.C.Beyer, deep level in SiC, thesis, 2011

7. V.Avrutin, D.Silversmith, Doping asymmetry problem in ZnO: current status and outlook, Proceedings of the IEEE, (2010)

8. N.Alvi, Luminescence Properties of ZnO Nanostructures Nanostructures and Their Implementation as white light emitting diodes (LEDs), thesis, (2011)

9. J.Li, S.Wei, Design of shallow acceptors in ZnO: First-principles band-structure calculations, Physical review, (2006) 081201-1-4

10. J.G.Reynolds, C.L.Reynolds, A.Mohanta, J.F.Muth, J.E.Rowe, Shallow acceptor complexes in p-type ZnO, APPLIED PHYSICS LETTERS (2013) 1521141-4

11. Y.Gai,G.Tang,J.Li, Formation of shallow acceptors in ZnO doped by lithium with the addition of nitrogen, journal of physics and chemistry of solids (2011)

12. K.Kobayashi, Y.Tomita, Y.Maeda, H.Haneda, Shallow Li-acceptor levels in ZnO films codoped with Li and F atoms, PSS, (2008)

13. J.Chu, A.Sher, Device Physics of Narrow Gap Semiconductors,book,springer (2010)