

بهینه سازی برخی از مشخصه های آشکارساز نقطه کوانتومی جدید GaN/AlGaN علی واحدی

گروه فیزیک، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران

چکیده

در این تحقیق برخی از مشخصه های آشکار ساز مبتنی بر ساختار جدید نقطه کوانتومی کروی GaN/AlGaN مطالعه شده است. برای این منظور ابتدا با استفاده از تقریب جرم موثر معادله شرودینگر در دستگاه مختصات کروی حل شد، سپس با استفاده از توابع موج، عناصر ماتریس گذار دو قطبی و قدرت نوسان کنندگی، ضریب جذب بدست آمد. نتایج نشان دادند افزایش اندازه نقص یعنی هسته و کسر مولی علاوه بر تغییر ضریب جذب سبب جابجایی پیک آن نیز می شوند. افزایش طول عمر تراز فقط سبب کاهش مقدار جذب می شود و قله جذب نیز بدون تغییر می ماند، همچنین با توجه به نوع ساختار افزایش اندازه پوسته نقطه کوانتومی تغییرات محسوسی در منحنی ایجاد نمی کند.

واژه های کلیدی: بهره کوانتومی، ضریب جذب، نقاط کوانتومی، نانوساختارهای AlGaIn/GaN

ایمیل نویسنده مسئول: vahedi@iaut.ac.ir

۱-مقدمه

در سالهای اخیر آشکارسازهای مادون قرمز ساخته شده بر پایه چاههای کوانتومی^۱ بسیار مورد توجه بوده اند، اما این آشکارسازها به دماهای پایین نیازمند هستند، زیرا میزان گسیل حرارتی بالایی دارند. یکی دیگر از مشکلات این آشکارسازها ناتوانی آنها برای آشکارسازی تابشهای نرمال با توجه به وجود قاعده گزینش قطبش است. بنابراین نیاز به اسباب کمکی و جانبی دارند که باعث حجیم شدن آشکارساز و بالا رفتن قیمت آنها می گردد [1-2]. تحقیقات جدید نشان می دهد ساختارهای جدید نقطه کوانتومی^۲ به علت دارا بودن ترازهای گسسته و گذارهای بین بانندی و زیرباندی می توانند جایگزین خوبی برای آشکارسازی در ناحیه مادون قرمز باشند. مزیت آشکارسازهای حاصل از نقاط کوانتومی به سه دلیل زیر است:

۱- حساسیت بالا به نورهای تابشی ۲- پایین بودن پراکندگی الکترون-فونون و بهره جریان بالا ۳- توانایی کار در دماهای بالا
نقاط کوانتومی نیمه رسانا در ابعاد نانومتری هستند که به دلیل قابل کنترل بودن اندازه شان دارای خواص جالب الکترونی و اپتیکی تنظیم پذیر هستند [3-4].
در ابعاد نانومتر قوانین مکانیک کوانتوم حاکم بوده و سری جدیدی از پدیده های فیزیکی ظهور می کنند. این پدیده ها موجب

گسترش نسل جدیدی از زیست حسگرها، آشکارسازهای مادون قرمز، لیزرهای دیودی و سلولهای خورشیدی شده است. تخمین پارامترهای مهم این ساختارها توسط مدل جرم موثر صورت می پذیرد. براین اساس گاف انرژی نقاط کوانتومی شامل گاف انرژی نیمرسانا در حالت توده ای، انرژی محصورسازی کوانتومی^۳ و انرژی برهمکنش الکترواستاتیک بین الکترون وحفره در اکسیتون می شود. طیف جذبی قوی و گسترده، طیف نشری باریک متقارن و تنظیم پذیر، بازده کوانتومی بالا و زمان گسیل طولانی از خواص مورد دلخواه نقاط کوانتومی محسوب می شوند [3-6]. بنابراین در سالهای اخیر آشکارسازهای مادون قرمز ساخته شده بر پایه چاههای کوانتومی بسیار مورد توجه بوده اند.

برخی از کوانتوم داتها از ترکیب نیمرسانا های گروه ۳ با ۵ و ۲ با ۶ بدست می آیند.

نقص کوانتومی^۴ و یا تغییر نحوه چیدن اتمها در سطح نقاط کوانتومی باعث تغییر در شکاف انرژی می شود. این نوع از نقاط کوانتومی خصوصیات یک نیمه هادی را از خود نشان می دهند [7].

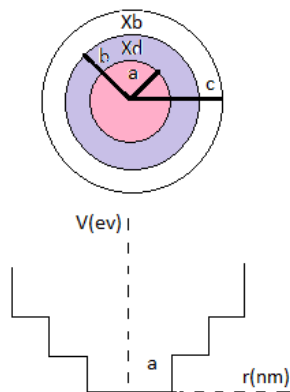
این خاصیت باعث ایجاد قابلیت تنظیم طول موج تابشی می شود، بنابراین با کنترل اندازه نانو ها می شود طول موجهای تابشی را مشخص کرد، به طوری که نقاط کوانتومی بزرگ، نور قرمز و نقاط کوانتومی کوچک نور آبی از خود ساطع می کنند [2-5]. ساختارهای نقاط کوانتومی کاربردهای زیادی در عکس برداری عمیق بافتها، اپتیک، LED ها و لیزرها دارند [5-6].

³ Quantum Confinement Effect

⁴ Quantum Defect

¹ Quantum Well

² Quantum Dot



شکل ۱: شکل هندسی و پتانسیل نقطه کوانتومی کروی

این ساختار از نوع هسته/پوسته/پوسته نوع اول می باشد. مطابق شکل پتانسیل برای نقص که در مرکز قرار دارد برابر صفر برای پوسته با کسره های مولی متفاوت x_b و x_d آلومینیوم به ترتیب برابر با V_{o2} و V_{o1} در نظر گرفته می شود.

معادله شرودینگر در مختصات کروی با در نظر گرفتن جرم موثر الکترون (m_i^*) و توزیع پتانسیل در نواحی مختلف به روش جدا سازی متغیرها بصورت تحلیلی حل می شود. جواب بخش زاویه ای هماهنگ های کروی بوده و بخش شعاعی نیز معادله بسل کروی است [5,7]:

$$r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + 2r \frac{dR}{dr} + \left\{ \frac{2m_i^*}{\hbar^2} [E - V_i(r)] r^2 - \ell(\ell+1) \right\} R = 0 \quad (1)$$

که در معادله فوق به ترتیب r, R, E و l فاصله از مرکز، جواب بخش شعاعی معادله، انرژی و اعداد صحیح می باشند. با معرفی

$$k_i^2 = \frac{2m_i^*}{\hbar^2} [E - V_i(r)] \quad \text{جواب معادله (۱) برای دو حالت}$$

انرژی های پتانسیل مورد نظری بصورت زیر نوشته می شود [۲]:
 برای $E < V_{o1}$

$$R(r) = \begin{cases} [C_1 j_\ell(k_1 r) + C_2 n_\ell(k_1 r)] \sqrt{\frac{2}{\pi}} & 0 < r < a \\ [C_3 i_\ell(k_2 r)] \sqrt{\frac{2}{\pi}} & a < r < b \\ [C_4 K_\ell(k_3 r)] \sqrt{\frac{\pi}{2}} & b < r \end{cases} \quad (2)$$

که در آن

در مقاله حاضر پس از حل معادله شرودینگر و تعیین توابع موج و ماتریس گذارد دو قطبی^۱، ساختار جدید $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ نقطه کوانتومی کروی^۲، وابستگی ضریب جذب به پارامترهایی نظیر اندازه نقص، پهنای زمان عمر^۳ و کسر مولی مورد بررسی قرار گرفته و نمودارهای مربوطه ترسیم و توصیف می شوند [7].

۲- مدلسازی

در کار حاضر برای افزایش و بهبود ویژگی های آشکار سازی مادون قرمز اثرات مربوط به گذارهای زیر باندهی مادون قرمز، ساختار جدید نقطه کوانتومی پیشنهاد می شود. ساختار نقاط کوانتومی به طور معمول به صورت پوسته/هسته^۴ می باشد. بسته به گاف نواری و محل نسبی سطوح انرژی الکترونی در نیم رساناهای مورد استفاده پوسته و هسته می توانند نقشهای مختلفی در نانو بلور داشته باشند. سه نوع ساختار کلی متفاوت را می توان برای سیستمهای هسته/پوسته در نظر گرفت [9]:

در ساختار نوع اول گاف نواری ماده ی پوسته از گاف نواری هسته بزرگتر بوده و هر دو الکترونها و حفره ها در هسته محبوس می شوند. در ساختار دوم گاف نواری ماده ی پوسته از گاف نواری هسته کوچکتر بوده و بسته به ضخامت پوسته، حفره ها و الکترونها به طور نسبی یا کامل در پوسته محبوس می شوند. در ساختار نوع آخر، لبه ی نوار ظرفیت یا لبه ی نوار رسانش ماده ی پوسته در میان گاف نواری هسته قرار می گیرد. با برانگیختگی نانو بلور، آرایش نواری به وجود آمده منجر به تفکیک فضایی حفره و الکترون و قرار گیری آنها در ناحیه های مختلف ساختار هسته/پوسته می شود. در نانو بلورهای هسته/پوسته، پوسته برای غیرفعال کردن سطح هسته با هدف بهبود خواص اپتیکی آن مورد استفاده قرار می گیرد.

استفاده از یک پوسته میانی کاهش دهنده ی تنش که بین هسته ی نانو بلور و پوسته ی خارجی ساندویچ می شود، برای اولین بار در سیستم هسته/پوسته/پوسته $\text{CdSe}/\text{ZnSe}/\text{ZnS}$ پیشنهاد شده است [10]. این گونه سیستم ها پایداری بالاتری در مقابل اکسیداسیون نوری نسبت به سیستم هسته/پوسته داشته و بهره های کوانتومی بالاتری دارند [11].

با توجه به اینکه گاف انرژی نیم رسانای GaN زیاد است و بسیاری از ویژگیهای اپتیکی آن مورد مطالعه قرار گرفته است [11]، بنابراین در مقاله حاضر ساختار کروی با قراردادن هسته GaN در مرکز دو پوسته $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ با ضخامتهای داخلی x_d و خارجی x_b متغیر پایه ریزی شده است. انرژی پتانسیل حاصل از این نمونه همانند شکل ۱ خواهد بود.

¹ Dipole Transition Matrix

² Spherical Quantum Dots.

³ Relaxation Time Width

⁴ Core /Shell

⁵ Quantum Efficiency

⁶ Effective mass

که Γ پهنای طول عمرتراز، N_d چگالی حجمی نقاط کوانتومی، n_{op} ضریب شکست ماده، $\mathcal{E}$ و $\mathcal{E}_0$ به ترتیب گذردهی الکتریکی محیط و خلاء می باشند. n_i و n_f نیز به ترتیب احتمال پرشدن ترازهای اولیه و نهائی هستند. برای دماهای پایین $n_i = 1$ و $n_f = 0$ می باشد. بهره کوانتومی^۳ به صورت میزان الکترون تولیدی به ازای فوتون تابشی تعریف می شود و با فرمول زیر بیان می شود [8]:

$$\eta = \alpha(\omega)L \left[V_{ec} e^{-E_{ec}/K_B T} / (V_0 + V_{ec} e^{-E_{ec}/K_B T}) \right] \quad (8)$$

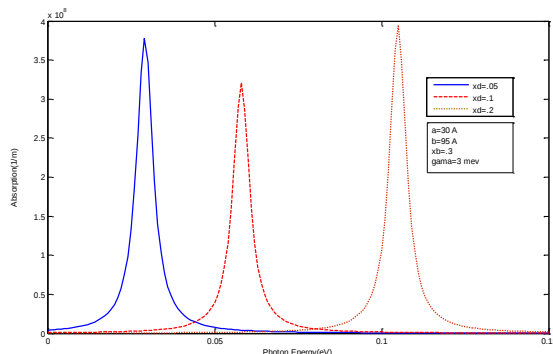
در رابطه فوق V_0 میزان واهلش از حالت برانگیخته فوتونی به بقیه حالات است و در اینجا تقریباً برابر 10^{10} است. L طول قطعه، E_{ec} اختلاف انرژی بین حالت پیوسته و برانگیختگی نوری وابسته به میدان است. V_{ec} در این ساختار تقریباً برابر 10^{13} است. این کمیت وابستگی ضعیفی به دما دارد و ضریب رهائی فونون^۴ به حالت پیوسته را نشان می دهد. برای $E_{ec} = 1.1 \text{ eV}$ مقدار داخل کروشه به بهره در دمای اتاق تقریباً برابر واحد می باشد یعنی می توان نوشت:

$$\eta \approx \alpha(\omega)L \quad (9)$$

برای کاربردهای آشکارسازی مادون قرمز نانو ساختارها ضریب بهره کوانتومی اهمیت زیادی دارد [4,6].

۱- تجزیه و تحلیل نتایج

در این بخش نتایج مربوط به تغییرات ضریب جذب به ازای کسره های مولی متفاوت آلومینیوم، اندازه نقص و پهنای عمرتراز بر حسب انرژی فوتون تابشی به دست می آید که از روی آن هم بهره کوانتومی قابل دستیابی است. لازم به توضیح است نمودارهای مربوط به پارامترهایی نظیر ترازهای انرژی، توابع موج و ماتریس گذار دو قطبی در کارهای قبلی آورده شده اند [7].



شکل ۲: تغییرات ضریب جذب به ازای کسره های مولی متفاوت آلومینیوم

$$\begin{cases} k_1 = \sqrt{\frac{2m_1^* E}{\hbar^2}} & 0 < r < a \\ k_2 = \sqrt{\frac{2m_2^* (V_{01} - E)}{\hbar^2}} & a < r < b \\ k_3 = \sqrt{\frac{2m_3^* (V_{02} - E)}{\hbar^2}} & b < r \end{cases} \quad (3)$$

است. و برای $V_{01} > E$

که در آن $k_2' = \sqrt{\frac{2m_2^* (E - V_{01})}{\hbar^2}}$ است. ضرایب C_i با اعمال شرطهای پیوستگی تابع موج و مشتق آن در مرزها و شرط نرمالیزاسیون بدست می آیند. پس از تعیین توابع موج حالت های پایه و برانگیخته اول یعنی ψ_i و ψ_f ماتریس گذاردو قطبی r_{if} را پیدا می کنیم.

$$\vec{r}_{if} = \langle \psi_i | \vec{r} | \psi_f \rangle \quad (5)$$

از روی ماتریس گذاردو قطبی قدرت نوسان کنندگی^۱ به صورت زیر به دست می آید [8].

$$f_{if} = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E_i - E_f) |r_{if}|^2 \quad (6)$$

در رابطه فوق E_i و E_f به ترتیب انرژی حالت های پایه و تحریکی اول می باشند.

جدول ۱: پارامترهای فیزیکی ساختار مورد نظر [2].

پارامترها	مقدار
جرم موثر الکترون	$0.252x + 0.228 (m_0)$
گاف انرژی $E_g(x)$	$6.13x + (1-x) \times 3.42 - x(1-x) (\text{eV})$
باند آفست $\Delta E_c(x)$	$0.7 \times [E_g(x) - E_g(0)] (\text{eV})$
چگالی حاملین بار N_d	$1 \times 10^{24} (m^{-3})$
ضریب شکست n_{op}	$(5.2 - .15x)^{\frac{1}{2}}$
گذردهی الکتریکی $\mathcal{E}$	$(-0.3x + 10.4) \mathcal{E}_0$
ثابت واهلش $\hbar\Gamma$	$0.3 (\text{meV})$

ضریب جذب^۲ نیز که پارامتر بسیار مهمی است با رابطه داده می شود [8].

$$\alpha = \frac{\pi \hbar N_d n_{op} e^2}{m^* \mathcal{E} \mathcal{E}_0 c} (n_i - n_f) f_{if} \frac{\Gamma}{(\hbar\omega - \hbar\omega_{if})^2 + \Gamma^2} \quad (7)$$

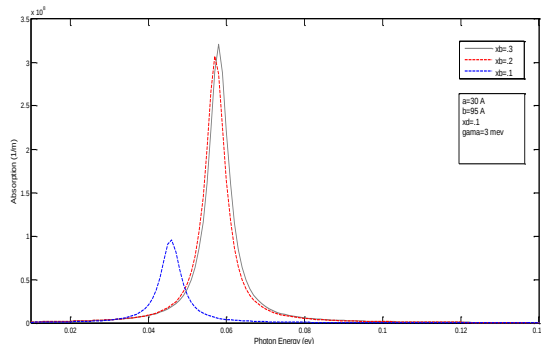
³ Quantum Efficiency

⁴ Phonon assisted escape

¹ Oscillator Strength

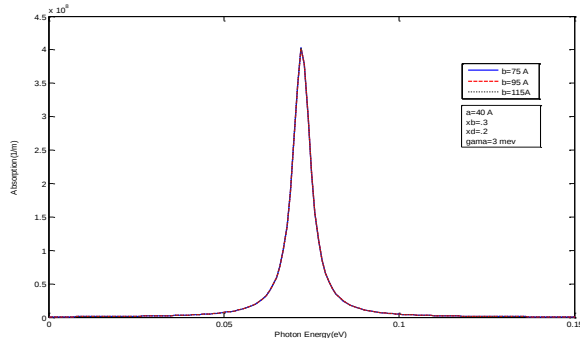
² Absorption Coefficient

شکل ۵ تغییرات ضریب جذب را به ازای کسر مولی مختلف پوسته خارجی (x_B) نشان می دهد.



شکل ۵ تغییرات ضریب جذب به ازای کسر مولی مختلف پوسته خارجی

در شکل ۵ دیده می شود افزایش کسر مولی آلومینیوم سبب افزایش جذب و جابجایی آبی قله آن می شود. این بدان معنی است که فاصله بین ترازهای انرژی با افزایش کسر مولی در این ناحیه کاهش یافته و به هم نزدیکتر می شوند [7].



شکل ۶ تغییرات ضریب جذب به ازای شعاعهای مختلف پوسته داخلی

شکل ۶ نمودار جذب برحسب انرژی فوتون تابشی را به ازای شعاعهای مختلف پوسته داخلی (b) نشان می دهد. می توان نتیجه گرفت با افزایش اندازه نقطه کوانتومی تغییرات محسوسی در منحنی ایجاد نمی شود، زیرا ساختار مورد مطالعه از نوع سیستم های هسته/پوسته اول بوده و محصورشدگی حاملین بار در ناحیه هسته اتفاق می افتد. ماکزیمم جذب منسوب به انرژی ۷/۲ میلی الکترون ولت است.

جدول ۲ قله جذب و به تبع آن بهره کوانتومی برای کسرهای مولی مختلف را نشان می دهد. با توجه به رابطه ۹ می بینیم که بهره کوانتومی باید با افزایش ضریب جذب و اندازه نقص افزایش یابد، نتایج این افزایش را با کمی خطا نشان می دهند که گمان می رود به علت رفتار تابع موج در اثر محصورشدگی کوانتومی باشد.

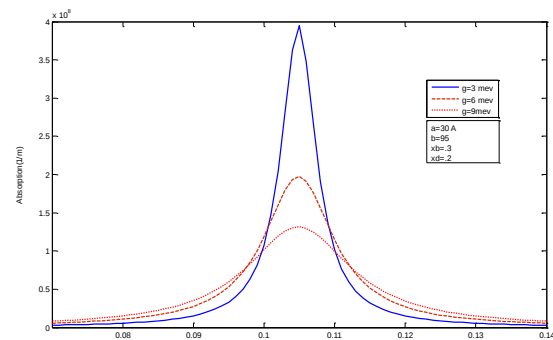
جدول ۲: قله جذب برای کسرهای مولی مختلف (x_B)

x_B	E (meV)	قله جذب ($10^{11}/m$)
-------	---------	----------------------------

شکل ۲ تغییرات ضریب جذب برحسب انرژی فوتون تابشی به نمونه را به ازای کسرهای مولی متفاوت آلومینیوم (در پوسته بیرونی) نشان می دهد.

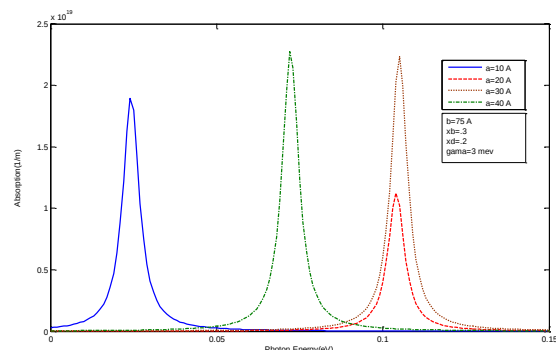
در شکل ۲ با افزایش کسر مولی مقدار ضریب جذب ابتدا کاهش و سپس افزایش می یابد این رفتار غیر عادی به رفتار غیر عادی ماتریس گذاردو قطبی و تابع موج مربوط می شود. همچنین با افزایش کسر مولی قله منحنی جذب شیفت آبی^۱ نشان می دهد [7].

شکل ۳ تغییرات ضریب جذب را برحسب انرژی فوتون تابشی به ازای مقادیر مختلف پهنای طول عمر تراز (g) نشان می دهد. از این شکل استنباط می شود افزایش طول عمر سبب کاهش قله جذب و تعریض آن می شود اما محل پیک تقریباً ثابت است.



شکل ۳ تغییرات ضریب جذب برحسب انرژی فوتون تابشی برای پهنای طول عمر تراز

تغییرات ضریب جذب به ازای انرژی فوتون تابشی برای اندازه های مختلف نقص مرکزی (a) که در شکل ۴ آورده شده است، نشان می دهد با افزایش اندازه نقص قله منحنی ابتدا به سمت طول موجهای آبی جابجا شده و سپس به سمت طول موج قرمز برمی گردد. این تغییرات جالب به علت اثرات محصور شدگی کوانتومی می تواند باشد.



شکل ۴: تغییرات ضریب جذب برحسب انرژی فوتون تابشی به ازای مقادیر مختلف نقص a

^۱ Blue Shift
^۲ Red Shift

4. M, Jr, Bruchez, et al., Semiconductor nanocrystals as fluorescent biological labels. *Science*, 281: 2013–2016, 1998.

5. M, Kouhi; A, Vahedi; A, Akbarzadeh; Y, Hanifehpour; S. W, Joo; Investigation of quadratic electro-optic effects and electro-absorption process in GaN/AlGaIn spherical quantum dot. *Nanoscale Research Letters*. 9: 9-13, 2014.

6. A, Rostami; et al; Defect-induced enhancement of absorption coefficient and electroabsorption properties in GaN/AlGaIn centered defect quantum box (CDQB) nanocrystal. *Physica B*. 403: 2789–2796, 2008.

7. A, Vahedi; M, kouhi; A, Rostami; Third order susceptibility enhancement using GaN based composite nanoparticle. *Optik*. 124: 6669-6675, 2013.

8. A, Asgari; M, Kalafi; L, Faraone; The effects of GaN Capping Layer Thickness on Two-dimensional Electron Mobility in GaN/AlGaIn/GaN Heterostructures. *Physica E*. 25: 431-437, 2005.

9. J, Bleuse; S, Carayon; P, Reiss; Optical Properties of Core/Multishell CdSe/Zn (S, Se) nanocrystals. *Physica E*, 21(2): 331-335, 2004.

10. A, Aharoni; T, Mokari; T, Popov; U, Banin; Synthesis of InAs/CdSe/ZnSe core/shell1/shell2 structures with bright and stable near-infrared fluorescence. *J, Am, Ch, Soc*. 128(1): 257-264, 2006.

11. p, k, kandaswamy; f, guillot; and et al; GAN/ALN short period superlattices for intersubband opto electronics: asystematic study of their epitaxial growth, design, and performance. *J, Appl, Phys*, 104(9), 093501, 2008.

12. O, K, Chang W, H, Sung; K, Sung and et al; High-performance graphene quantum-dot photodetectors. *Scientific Reports*, 4: 5603, 2014.

0/05	29	۳/۷۸۱
۰/۱	58	۳/۲۰۷
۰/۲	105	۳/۹۴۸

می توان با تغییر پارامترهای فیزیکی نقطه کوانتومی تغییرات محسوسی درمنحنی جذب برحسب انرژیهای فوتون تابشی ایجاد کرد و ماکزیمم جذب را انتقال داد. ساختارهای مختلف نقطه کوانتومی از نظر کاربرد در آشکارسازها دارای اهمیت زیادی بوده و مرکز توجه بسیاری از محققین می باشد [12-15].

نتیجه گیری

نمودارها نشان می دهند با افزایش کسرهای مولی، محل پیک و مقدار آن عمدتاً به سمت انرژیهای بیشتر یعنی طول موجهای کوتاهتر شیفیت پیدا می کند. این تغییرات برای پوسته مرکزی مقدار بیشتری نسبت به پوسته خارجی نشان می دهد. با افزایش اندازه نقطه کوانتومی تغییرات محسوسی درمنحنی ایجاد نمی شود، اما وابستگی جذب به شعاع هسته مرکزی بسیار قوی است، زیرا ساختار مورد مطالعه از نوع سیستم های هسته/پوسته اول بوده و محصورشدگی حاملین بار در ناحیه هسته اتفاق می افتد. افزایش زمان واهلش نیز سبب پایین آمدن ضریب جذب و افزایش پهنای منحنی می شود، یعنی اتلاف در سیستم بالا می رود. ضریب جذب از مرتبه 10^4 می باشد که در مقایسه با بقیه نانوساختارها دارای مقدار بزرگتری می باشد. این نتایج برای بهینه سازی عملکرد آشکارسازهای مبتنی بر نقاط کوانتومی می توانند مفید باشد [1,6].

۵. منابع

1. S, J, Liang; W, F, Xie; The hydrostatic pressure and temperature effects on a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot. *Eur, Phys, J, B* 81: 79-84, 2011.
2. H, Absalan; A, SalmanOgli; R, Rostami; Simulation of a broadband nano-biosensor based on an onion-like quantum dot-quantum well structure. *Quantum Electronics* 43(7): 674 – 678, 2013.
3. SH, Asadpour; Z, Golsanamlou; H, Rahimpour; H, Soleimani; Infrared and terahertz signal detection in a quantum dot nanostructure. *Phys, E*, 54:45–52. 2013.



13. A, D, Iacovo; C, Venettacci; L, Colace; L, Scopa; S, Foglia; PbS Colloidal Quantum Dot Photodetectors operating in the near infrared. Scientific Reports, 6: 37913, 2016.
14. S, Siontas; P, Liu; A, Zaslavsky; and D, Pacifici; Noise performance of high-efficiency germanium quantum dot photodetectors. Appl, Phys, Lett, 109: 053508, 2016.
15. R, K, Gujral; V, Damodaran; K, Ghosh; A Theoretical Analysis of the Dark Current in Quantum Dot Infrared Photodetector using Non- Equilibrium Green's Function Model. Ind, J, of Science and Technology. 9 (36): 102908, 2016.