

## مطالعه ساختار الکترونی و طیف لومینسانس نیم رسانای هسته-چند پوسته

الهه ناموری<sup>1\*</sup>، سعید شجاعی<sup>2</sup>، اصغر عسگری<sup>3,4</sup>

1. دانشجوی دکتری، پردیس بین المللی ارس، دانشگاه تبریز، ایران

2. دانشیار، گروه فوتونیک الکترونیک، پژوهشکده فیزیک و ستاره‌شناسی، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران

3. استاد، گروه فوتونیک الکترونیک، پژوهشکده فیزیک و ستاره‌شناسی، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران

4. دانشکده مهندسی کامپیوتر و الکترونیک، دانشگاه استرالیای غربی، استرالیا

تاریخ دریافت: 1396/04/23 تاریخ پذیرش: 1396/06/20

## The Study of Electronic Structure and Luminescence Spectrum of Core-Multi Shell Semiconductor Nano Wire

E. Namvari<sup>\*1</sup>, S. Shojaei<sup>2</sup>, A. Asgari<sup>3,4</sup>

1. PhD Student, Aras International Campus - University of Tabriz, Tabriz, Iran

2. Associate Professor, Photonics department, Research Institute for Applied Physics & Astronomy (RIAPA) University of Tabriz, Tabriz, Iran

3. Professor, Photonics Department, Research Institute for Applied Physics & Astronomy (RIAPA) University of Tabriz, Tabriz, Iran

4. School of Electrical, Electronic and Computer Engineering, The University of Western Australia, Australia

Received: 2017/07/14 Accepted: 2017/09/11

### Abstract

In this article luminescence emission of Non-polar Core-Multi Shell Semiconductor  $Al_{0.3}Ga_{0.7}N/GaN$  Nano Wire with radial symmetric has been investigated. The self-consistent approach is used to solve the system of Schrodinger-Poisson equations to obtain wave functions, energy levels and band tilting that have the key roles in luminescence emission. Our results have many implications in experiment.

### Keywords

Luminescence Emission, Structure of None Polar Core-Multi Shells Semiconductor, Free Carriers, Schrodinger-Poisson Self-Consistent Approach.

### چکیده

در این مقاله، طیف لومینسانس گسیلی از چپش هسته-چند پوسته در نانو سیم‌های نیم رسانای غیر قطبشی  $Al_{0.3}Ga_{0.7}N/GaN$  با تقارن شعاعی بررسی شده است. حل خودسازگار معادلات شرودینگر و پواسون پایه اصلی محاسبات عددی برای به دست آوردن توابع موج، ترازهای انرژی، کج شدگی‌های باند در اثر آرایش مناسب در سیستم و تأثیرات آن در طیف لومینسانس گسیلی از نانوسیم است. نتایج مقاله دارای کاربردهای فراوان در پیش‌بینی نتایج تجربی و عملکرد افزاره‌های اپتوالکترونیکی بر مبنای نانوسیم‌های نیم رسانا است.

### واژگان کلیدی

لومینسانس، ساختار نانوسیم هسته - پوسته، ساختار نیتزیدی غیر قطبشی هسته - پوسته، چگالی بار آزاد، حل خودسازگار شرودینگر-پواسون.



شکل 1. مدل نانو سیم هسته - چند پوسته (نمودار رنگی)، تعیین محل دوپینگ (نمودار سیاه و سفید)

برای محاسبه لومینسانس ناشی از این چینش از رابطه (1) استفاده می‌شود:

$$(1) \quad \tau(\omega) \propto \sum_{nm} |S_{nm}|^2 \int \frac{dk}{2\pi} \mathcal{F}^e(\epsilon_{nk}^e, T) (1 - \mathcal{F}^h(\epsilon_{mk}^h - \mu, T)) \times \Gamma(\epsilon_{nk}^e - \epsilon_{mk}^h - \hbar\omega - \gamma)$$

که در آن  $S_{nm} = \int d\vec{r} \psi_n^e(\vec{r}) \psi_m^h(\vec{r})$  است.  $S_{nm}$  معرف تابع هم‌پوشانی بین تراز  $n$ ام باند رسانش و تراز  $m$ ام باند ظرفیت،  $\mathcal{F}^e(\epsilon_{nk}^e, T)$  تابع پرشدگی فرمی الکترون (حفره) در دمای اتاق،  $\Gamma$  تابع پهن‌شدگی لورنتس است که میزان پهن‌شدگی پدیده شناختی آن،  $\gamma$ ، معادل 1meV قرار گرفته است [21].

اساس و پایه محاسبات برای به دست آوردن اطلاعات اولیه و درج آن در رابطه (1) بر پایه تعریف پتانسیل کوهن - شم مطابق با رابطه (2) و درج آن در معادلات خودسازگار شرودینگر - پواسون است.

$$V_{KS}(\vec{r}) = V(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r}) \quad (2)$$

در این معادله پتانسیل ساختار باند ( $V$ )، پتانسیل هارتزی ( $V_H$ ) و پتانسیل ناشی از همبستگی جفت‌شدگی ( $V_{XC}$ ) که در این مقاله از آن صرف‌نظر شده است، ساختار مدل را تعریف می‌کنند.

با چشم‌پوشی از اثر تجمعی بارها در گوشه‌ها می‌توان از معادله جرم موثر شرودینگر برای الکترون و حفره در سیستم شعاعی استفاده کرد و با درج پتانسیل مناسب در آن توابع موج و ترازهای انرژی مربوط را مطابق رابطه زیر محاسبه کرد.

## مقدمه

استفاده از نانوسیم‌های نیم رسانا (NWS) [9-14] در کاربردهای اپتوالکترونیکی مانند سنسورها [1 و 2] سلول‌های خورشیدی [3-5]، مواد الکترونیکی هوشمند [6-8] دیودهای نورگسیل (LEDs) و آشکارسازها [15-20]، نظر دانشمندان را هم در آزمایشگاه‌های تجربی و هم در مطالعات نظری به خود جلب کرده است.

امروزه، رشد نانو سیم‌های نیتزیدی و مطالعه انواع لومینسانس به ویژه در صفحات نیتزیدی غیر قطبشی یکی از علاقه‌مندی‌های خاص گروه‌های تجربی را به خود اختصاص داده است. با وجود پیشرفت‌های بسیار در زمینه‌های تجربی این نانو سیم‌ها از قبیل رشد انواع مختلف آن به صورت دیسک‌های متناوب [20 و 21] با آرایش‌های گوناگون و ساختارهای هسته-پوسته و هسته-چند پوسته [22 و 23]، محاسبات عددی کامل و جامعی برای مطالعه لومینسانس ناشی از تغییر ساختار و چینش این نانو سیم‌ها گزارش نشده است. محاسبات ساختار الکترونی، اثر افزایش آرایش بر روی این ساختار و کج‌شدگی آنها، محل دقیق تراز فرمی، مطالعه چگالی احتمال وجود ذرات و محاسبه دقیق گذارهای ممکن در لومینسانس از جمله مسائل مهمی است که در این مقاله مورد مطالعه دقیق قرار گرفته است.

## مدل بندی

در شکل (1) یک نمونه از نانوسیم نیم رسانای هسته-چند پوسته به طور شماتیک مدل‌سازی شده است. در این نمونه لایه‌های مختلف مواد نیتزیدی  $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$  با تقارن شعاعی حول محور چیده شده‌اند و دو مکان ثابت آلابیدگی از نوع  $n$  در اطراف محور و در بین لایه‌های مختلف در نظر گرفته شده است. این مکان آلابیدگی در طول مقاله ثابت فرض شده است. در این مقاله چینش‌های مواد مختلف در امتداد صفحات غیر قطبشی از ساختار ورتسایت از مواد نیتزیدی در نظر گرفته شده است که آن را از محاسبات دیگر [21] متمایز می‌کند.

هنگام در کنار هم قرار گرفتن ساختارهای نیتزیدی است [22].

هر چند قطبش، یکی از مشخصه‌های مهم در مواد نیتزیدی است اما در ساختارهای خاصی از نانو سیم‌ها این اثر به طور کلی حذف می‌شود. ساختارهای هسته-پوسته یکی از انواع چینش‌ها هستند که باعث می‌شوند یکی از مشخصه‌های اصلی مواد نیتزیدی، یعنی قطبش آن از معادلات حذف شود. دلیل آن را باید در مطالعه ساختار ورتسایت این مواد جستجو کرد.

هنگامی که مواد در راستای صفحه‌های غیر قطبی  $m$  حول محور رشد و با تقارن کامل رشد می‌کنند، هر دو قطبش خودبه‌خودی و پیزوالکتریک صفر می‌شوند. به این ترتیب آخرین قسمت از معادله (6) صفر است و چگالی بار قطبشی در معادلات وارد نمی‌شود [23].

در ادامه روند حل مسئله، پاسخ معادله پواسون (7)، پتانسیل هارتری است که نقش مهمی در میزان کج‌شدگی ساختار باند و تاثیر آن را در جابه‌جایی ترازهای انرژی و ایجاد تغییر در چگالی احتمال وجود حاملان دارد. شرط اتمام حلقه خودسازگار شرویدینگر-پواسون نیز ثابت شدن مقادیر انرژی، تراز فرمی و توابع موج است که بررسی هم‌گرایی این سه پارامتر اصلی به طور هم‌زمان از ویژگی‌های خاص محاسبات درج شده در این مقاله است.

### محاسبات و نتایج

در این مقاله نمونه خاصی از نانو سیم با یک هسته و پنج پوسته مطابق شکل (2) بررسی گردیده است. در این نمونه هسته از جنس GaN و پوسته‌ها به صورت لایه‌های متناوبی از GaN/AlGaIn با اطلاعات فیزیکی مشخص طبق جدول (1) هستند.

میزان آلایدیگی در نظر گرفته شده در سیستم موقعیت  $\rho_D = 1.44 \times 10^{19} (1/cm^3)$  در شعاع‌های 2 و 7 نانومتری از محور و با ضخامت 0.5nm در مطابق با شکل (1) در نظر گرفته شده است.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \frac{\rho}{m_{e(h)}^*} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \right. \quad (3)$$

$$\left. V_{ks}(\vec{\rho}) \right] \psi_{n(m)}^{e(h)}(\vec{\rho}) = \epsilon_{r_{n(m)}}^{e(h)} \psi_{n(m)}^{e(h)}(\vec{\rho})$$

در این رابطه  $\vec{\rho} = (x, y)$  معرف شعاع محیطی در سطح مقطع سیم لوله،  $(\epsilon_{r_{n(m)}}^{e(h)}, \psi_{n(m)}^{e(h)})$  توابع موج و ترازهای انرژی مجاز در کل سیستم مدل شده هستند. مقدار جرم موثر الکترون و حفره را در امتداد عمود بر راستای محور  $Z$  نشان می‌دهد. مقادیر محاسبه شده از رابطه (3) برای به دست آوردن چگالی بار کل، مطابق روابط (4-6) زیر استفاده می‌شود. با جای‌گذاری معادله (6) در معادله پواسون (7) می‌توان پتانسیل هارتری را که معرف میزان کج‌شدگی ساختار باند است، محاسبه کرد.

$$n_e(\vec{\rho}) = \sum_n |\psi_n^e(\vec{\rho})|^2 \frac{k_B T m_e^*}{\pi \hbar^2} \ln \left[ 1 + e^{\frac{\mu - E}{k_B T}} \right] \quad (4)$$

$$n_h(\vec{\rho}) = \sum_m |\psi_m^h(\vec{\rho})|^2 \frac{k_B T m_h^*}{\pi \hbar^2} \ln \left[ 1 + e^{(E - \mu)/k_B T} \right] \quad (5)$$

$$\rho_{tot}(\vec{\rho}) = e[n_h(\vec{\rho}) - n_e(\vec{\rho}) + \rho_D(\vec{\rho}) - \rho_A(\vec{\rho})] + \sigma (= \nabla \cdot \vec{P}) \quad (6)$$

$$\nabla_{\vec{\rho}} [\epsilon(\vec{\rho}) \nabla_{\vec{\rho}} V_H(\vec{\rho})] = -\rho_{tot}(\vec{\rho}) / \epsilon_0 \quad (7)$$

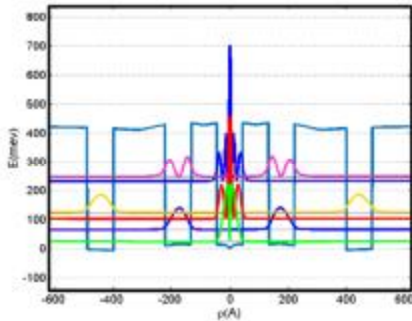
در روابط بالا،  $\mu$ ،  $T$  و  $\vec{P}$  به ترتیب تراز فرمی، دما و قطبش هستند.

قطبش یکی از موارد مهم در مواد نیتزیدی است که از دو چشمه ناشی می‌شود، یکی قطبش خودبه‌خودی که ناشی از چینش مواد با قطبش ذاتی در ساختار مولکولی است و دیگری قطبش پیزوالکتریک است که ناشی از کشش‌ها و تنش‌های ناشی از جفت نشدن ساختار شبکه

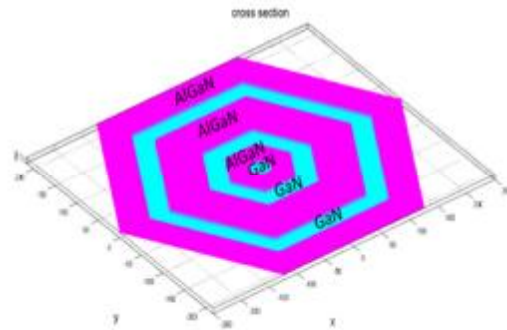
جدول 1. Physical Parameters of Al<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N at 300 K

Property	unit	Ref.
Al <sub>0.3</sub> Ga <sub>0.7</sub> N		
Static dielectric constant	10.31	$\epsilon_0$
electron effective mass at 300K $m_e^\perp = m_e^\parallel$	0.20	$m_0$
Heavy hole effective mess parallel axes z $m_h^\parallel$	1.87	$m_0$
effective mess of hole in z axes in barrier $m_h^\perp$	3.05	$m_0$
wurtzite GaN		
Band gap	3.42	ev
Static dielectric constant	10.4	$\epsilon_0$
electron effective mass at 300K $m_e^\perp = m_e^\parallel$	0.20	$m_0$
Heavy hole effective mess parallel axis z $m_h^\parallel$	1.1	$m_0$
effective mess of hole in z axis in barrier $m_h^\perp$	1.6	$m_0$

مطابق با تابع موج اول توزیع خواهند شد و در ترازهای بعدی چگالی کمتری از بار آزاد متمرکز خواهد بود.



شکل 3: ساختار باند، ترازهای انرژی و توابع موج



شکل 2. مدل نانو سیم هسته-چند پوسته

همان طور که در شکل (3) نشان داده شده است، شش تراز مجاز برای قرار گرفتن الکترون‌ها در باند رسانش وجود دارد. محاسبات مربوط به چگالی احتمال وجود حاملان (الکترون‌ها) در این شش تراز انرژی میزان شدت لومینسانس و تغییرات ساختار باندی را نشان می‌دهند. در شکل (4) چگالی بار آزاد الکترونی دوبعدی (2DEG) در باند رسانش نشان داده شده است. این بارها که نتیجه یونیزه شدن دوپندها در سیستم هستند، درون سیستم حرکت می‌کنند در نهایت به درون چاه‌ها می‌رسند و در آنها حبس می‌شوند. بار منفی این الکترون‌ها و بار مثبت دوپندهای یونیزه شده آنها را به سمت دیواره‌های چاه می‌کشاند و باعث ظهور میدان الکتریکی در دو طرف ساختار چاه کوانتومی و در نهایت کج شدن لبه آن می‌شود.

محاسبات خودسازگاری شرویدینگر- پواسون برای کل ساختار به صورت منسجم در تکرارهای متوالی طبق یک الگوریتم منظم [21]، تا دستیابی به شرط هم‌گرایی ادامه پیدا می‌کند. پاسخ معادلات بعد از هم‌گرایی را می‌توان در کج شدگی ساختار باند، ترازهای انرژی و توابع موج مطابق شکل (3) مشاهده کرد. هر چند شکل (3) وجود پنج چاه کوانتومی متناظر با لایه‌های GaN را نشان می‌دهد اما باید در نظر داشت که پتانسیل معرف این چاه‌ها از مرکز در راستای شعاعی در تنها یک مرحله به وسیله پتانسیل کوهن-شم به معادلات شناسانده شده است. انرژی‌های محاسبه شده در باند رسانش این ساختار بترتیب 32، 77، 109، 121، 240 و 256 میلی الکترون ولت و انرژی فرمی محاسبه شده برای ساختار 57 میلی الکترون ولت است. که مطابق با آن تنها یک تراز زیر تراز فرمی در ساختار قرار دارد؛ بنابراین قسمت عمده بارهای آزاد در تراز انرژی پایه و

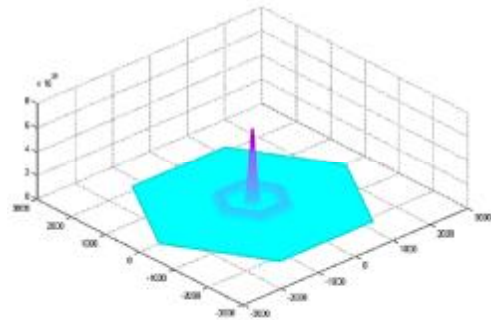
در ادامه با تغییر در میزان آرایش محاسبات تکرار شده است. مقادیر محاسبه شده انرژی مجاز برای باند رسانش با  $\rho_D = 1.38 \times 10^{19} (1/cm^3)$  به ترتیب 32، 77، 110، 122، 240 و 257 میلی الکترون ولت و انرژی فرمی 57 میلی الکترون ولت و با انتخاب  $\rho_D = 1.89 \times 10^{19} (1/cm^3)$  مقادیر مجاز برای باند رسانش به ترتیب 30، 69، 108، 114، 238 و 248 میلی الکترون ولت و انرژی فرمی 54 میلی الکترون ولت است.

با تکرار محاسبات لومینسانس برای این مقادیر متفاوت آرایش مشاهده شد که علی‌رغم تغییر در میزان کج‌شدگی‌های لبه باند، تغییری در انرژی گسیلی وجود نداشته است.

### نتیجه‌گیری

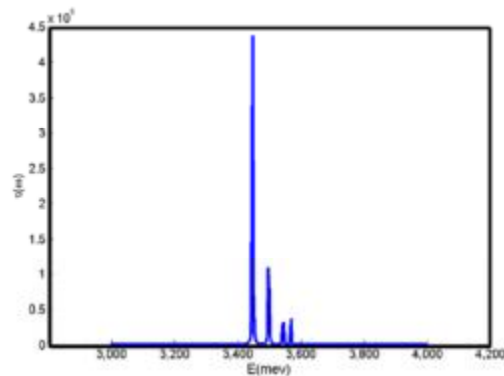
در این مقاله ترازهای انرژی و توابع موج نوع خاصی از نانوسیم‌های نیم رسانای نیتریدی غیر قطبشی با در نظر گرفتن دو محل ثابت آرایش و مقادیر مختلف آن به صورت عددی و با استفاده از حل خودسازگار شرودینگر-پواسون در مختصات قطبی-کروی بررسی گردید و ارتباط بین طیف لومینسانس ناشی از گذارهای محاسبه شده و میزان شدت آن با توجه به چگالی گاز الکترونی دوبعدی و توابع موج آنها بررسی شد.

مطابق محاسبات انجام شده، تعداد و ارتفاع پیک‌های موجود در طیف لومینسانس به ترازهای انرژی، توابع موج و میزان چگالی گاز دوبعدی مرتبط است. تاثیر میزان آرایش نیز در این مقاله بررسی شد که مطابق با آن افزایش در این میزان باعث تغییر در ساختار باند از محل قرار گرفتن دوپینگ و جابه‌جایی ترازهای انرژی می‌شود، اما نقش چندانی در لومینسانس نداشته است که علت آن را به تغییرات یکسان در ترازهای انرژی باند ظرفیت و رسانش و یکسان بودن فاصله ترازها در هر مورد نسبت می‌دهیم.



شکل 4. چگالی بار الکترونی آزاد دوبعدی (2DEG)

از تناظر بین شکل (3) و شکل (4) می‌توان ارتباط بین توابع موج و احتمال حضور بارهای آزاد در لایه مرکزی GaN را به خوبی ملاحظه کرد. آنچه که از شکل (3) انتظار می‌رود این است که به دلیل محاسبه شش تراز مجاز در باند رسانش بتوانیم شاهد شش پیک در طیف لومینسانس باند به باند باشیم. این در حالی است که طیف لومینسانس محاسبه شده در شکل (5) تنها یک پیک پرشدت از خود نشان می‌دهد و پیک‌های دیگر با وجود داشتن انرژی بیشتر شدت چندانی ندارند. علت این پدیده را می‌توان در تعداد ترازهای مجاز قرار گرفته زیر تراز فرمی جستجو کرد. در واقع پیک‌های مربوط به گذار مرکزی به علت داشتن چگالی گاز الکترونی دوبعدی (2DEG) بیشتر، از احتمال گذار بیشتری برخوردار بوده و در نتیجه بازترکیب‌های بیشتری در آن اتفاق خواهد افتاد؛ بنابراین این پیک بلندتر خواهند بود.



شکل 5. لومینسانس مربوط به ساختار هسته-چند پوسته

## References

- [1] N. Xi, K.W. Chiu Lai, Nano-Optoelectronic Sensors and Devices, Great Britain, Oxford, 2010.
- [2] D. Decoster, J. Harari, Optoelectronic Sensors, Great Britain, 2009, ISBN: 978-1-84821-078-3.
- [3] X. Wang, W. Z, High-Efficiency Solar Cells, Springer Cham Heidelberg New York Dordrecht London, 2014, ISBN 978-3-319-01987-1.
- [4] A. Shah, Thin-Film Silicon Solar Cells, EPFL Press, 2010, ISBN 978-1-4398-0810-8.
- [5] M. Tchernycheva, C. Sartel, G. Cirlin, L. Travers, G. Patriarche, J.-C. Harmand, et al., Growth of GaN free-standing nanowires by plasma-assisted molecular beam epitaxy: structural and optical characterization, Nanotechnology. 18 (2007) 385306.
- [6] J. Singh, Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures, Cambridge, 2003.
- [7] U. Mishra, J. Singh, Semiconductor Device Physics and Design, Springer, 2008, ISBN 978-1-4020-6480-7.
- [8] J. Piprek, Optoelectronic Devices, Springer, 2004, ISBN 0-387-22659-1.
- [9] J. Hu, T.W. Odom, C.M.A. Lieber, Chemistry and Physics in One Dimension: Synthesis and Properties of Nanowires and Nanotubes, Chem. Res. 32 (1999) 435–445.
- [10] Y. Cui, C.M. Lieber, Functional nanoscale electronic devices assembled using silicon nanowire building blocks, Science. 291 (2001) 851–853.
- [11] C. Thelander, Nanowire-based one-dimensional electronics, Mater. Today. 9 (2006) 28–35.
- [12] C.M. Lieber, Z.L. Wang, Functional Nanowires, MRS Bull. 32 (2007) 99–108.
- [13] W. Lu, C.M. Lieber, Nanoelectronics from the bottom up, Nat. Mater. 6 (2007) 841.
- [14] G. Zheng, W. Lu, S. Jin, C.M. Lieber, Synthesis and fabrication of high-performance n-type silicon nanowire transistors, Adv. Mater. 16 (2004) 1890–1893.
- [15] L. Zagonal, M. Tchernycheva, L. Rigutti, R. Songmuang, G. Tourbot, B. Daudin, et al., Cathodoluminescence assessment of III-V nanowire heterostructures, in: Eur. Microsc. Soc. Present. Proc. of The 15th Eur. Microsc. Congr. Manchester Cent. United Kingdom, 2012: p. 2.
- [16] H. Zhang, et al., Flexible photodiodes based on nitride core/shell p-n junction nanowires, ACS Appl. Mater. Interfaces. (2016) 6414.
- [17] N. Guan, et al., Flexible white light emitting diodes based nitride nanowires and nanophosphors, ACS Photonics. 3(4) (2016) 597–603.
- [18] U. Jahn, J. Ristic, E. Calleja, Cathodoluminescence spectroscopy and imaging of GaN / (Al, Ga) N nanocolumns containing quantum disks, Appl. Phys. Lett. 90 (2007) 3.
- [19] A. De Luna Bugallo, L. Rigutti, G. Jacopin, F.H. Julien, C. Durand, et al., Single-wire photodetectors based on InGaN/GaN radial quantum wells in GaN wires grown by catalyst-free metal-organic vapor phase epitaxy, Appl. Phys. Lett. 98 (2011) 233107.
- [20] L. Rigutti, M. Tchernycheva, A. De Luna Bugallo, G. Jacopin, F.H. Julien, L.F. Zagonel, et al., Ultraviolet Photodetector Based on GaN/AlN Quantum Disks in a Single Nanowire, Nano Lett. 10 (2010) 2939–2943.
- [21] E. Namvari, S. Shojaei, A. Asgari, Luminescence Emission from Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N/GaN Multi Quantum Disc core/shell Nanowire: Numerical approach, Phys. E Low-Dimensional Syst. Nanostructures. 93 (2017) 132–142.
- [22] J. Jadczyk, P. Plochocka, A. Mitioglu, I. Breslavetz, M. Royo, A. Bertoni, et al., Unintentional High-Density p-Type Modulation Doping of a GaAs/AlAs Core–Multishell Nanowire, Nano Lett. 14 (2014) 2807–2814.
- [23] G.T. Wong, B. M., Leonard, F., Li, Q., Wang, Nanoscale Effects on Heterojunction Electron Gases in GaN/AlGaIn Core/Shell Nanowires, Nano Lett. 11 (2011) 3074–3079.