

ORIGINAL ARTICLE

Optical Efficiency of Spontaneous Emission in Polarized and Non-Polarized Nanowire Hybrid Semiconductor System

Elahe Namvari^{1*}, Saeed Shojaei²

1 Ph.D, Department of Physics Education, Farhangian University, Tehran, Iran.

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

Correspondence

Elahe Namvari

Email: elaheNamvari@cfu.ac.ir

How to cite

Namvari, E. Shojaei, S. (2025). Optical Efficiency of Spontaneous Emission in Polarized and Non-Polarized Nanowire Hybrid Semiconductor System, Optoelectronic, 7(4), 45-56.

ABSTRACT

The increasing use of group III nitride structures in electro-optical devices, as well as the development of studies on the light-emitting structures and optical properties of these devices, including lasers, photodiodes, and detectors, have caused intense interest of scientists in this field. Since in some cases the size of the diameter of the nanowire was not suitable for observing the quantum confinement effects, combinations of quantum wells resulting from different structures of growth and layering inside the nanowires, known as hybrid structures, have been considered. These quantum wells are formed directly on the faces of the nanowires or along the axis and create the proper arrangement to induce quantum confinement effects. In this article, a suitable numerical solution defined for accurate calculation of band structure, wave functions, carrier probability density and its distribution, and the luminescence spectrum caused by spontaneous emission due to pollution in this system. Also, in this article, the effects of polarization are investigated in theoretical calculations based on the structural information of AlGaIn/GaN hybrid semiconductor nanowires in two forms, quantum disk and core-shell, and its effect on emission luminescence is calculated, which can be obtained with widely used experimental samples. It is a comparison. The performed numerical calculations are based on the self-consistent solution of Schrödinger and Poisson, along with explanation of how the particles move and their distribution probability, which is very good in terms of accuracy compared to similar works.

KEYWORDS

Luminescence, Quantum, Spontaneous Emission, Nanowire, Hybrid Semiconductor.

فصلنامه علمی

اپتوالکترونیک

«مقاله پژوهشی»

بهره نوری گسیل خودبه خودی در سامانه نیم رسانای هیبریدی قطبشی و غیر قطبشی نانوسیم

الهه ناموری^{۱*}، سعید شجاعی^۲

۱ دکتر، گروه آموزشی فیزیک، دانشگاه فرهنگیان، تهران، ایران.
۲ استاد، گروه فتونیک، پژوهشکده فیزیک و ستاره‌شناسی، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران.

چکیده

افزایش روزافزون کاربرد ساختارهای نیتزیدی گروه III در ابزارهای الکترواپتیکی و همچنین توسعه مطالعات پیرامون ساختارهای نورگسیل و خواص نوری این ابزارها از جمله لیزرها، فتودیودها و آشکارسازها، موجبات علاقه‌مندی شدید دانشمندان در این حوزه را فراهم ساخته است. از آنجایی که در برخی موارد اندازه قطر نانوسیم برای مشاهده اثرات محدودسازی کوانتومی مناسب نبوده است؛ لذا ترکیباتی از چاه‌های کوانتومی ناشی از ساختارهای متفاوت رشد و لایه نشانی درون نانوسیم‌ها معروف به ساختار هیبریدی مورد توجه قرار گرفتند. این چاه‌های کوانتومی به طور مستقیم روی وجوه نانوسیم‌ها یا در امتداد محور تشکیل می‌شوند و چپش مناسب را برای ایجاد اثرات محدودیت کوانتومی ایجاد می‌کنند. در این مقاله یک راه حل عددی مناسب برای محاسبه دقیق ساختار باندی، توابع موج، چگالی احتمال حاملین و نحوه توزیع آن و طیف لومینسانس ناشی از گسیل خودبه خودی در اثر اعمال آلایش در این سیستم تعریف می‌شود. همچنین در این مقاله اثرات قطبش در محاسبات نظری بر اساس اطلاعات ساختاری نانوسیم‌های نیم رسانای هیبریدی AlGaIn/GaN به دو صورت دیسک کوانتومی و هسته پوسته بررسی شده و تاثیر آن در لومینسانس گسیلی محاسبه شده است که با نمونه‌های پرکاربرد تجربی قابل مقایسه است. محاسبات عددی انجام شده بر اساس حل خودسازگار شرودینگر و پواسون همراه با توضیح چگونگی حرکت ذرات و احتمال توزیع آنها است که از نظر دقت در مقایسه با کارهای مشابه، بسیار خوب است.

واژه‌های کلیدی

لومینسانس، کوانتومی، گسیل خودبه خودی، نانوسیم، نیم رسانای هیبریدی.

نویسنده مسئول:

الهه ناموری

رایانامه: elahenamvari@cfu.ac.ir

استناد به این مقاله:

الهه ناموری، سعید شجاعی (۱۴۰۴). بهره نوری گسیل خودبه خودی در سامانه نیم رسانای هیبریدی قطبشی و غیر قطبشی نانوسیم. فصلنامه علمی اپتوالکترونیک، ۷(۴)، ۴۵-۵۶.

<https://jphys.journals.pnu.ac.ir>

مقدمه

رشد روزافزون مطالعات و تکنولوژی‌ها بر اساس نانوسیم‌های نیم‌رسانا، آنها را به سکویی برای پیشرفت در ساختارهای مرکب، خودسازنده و نانوساختارهای بدون نقص تبدیل کرده است. مطالعات اخیر دانشمندان حاکی از کاربردی بودن ساختارهای نانوسیم در ساخت لیزرها و آشکارسازهای دیودی است [۱]. در طول سال‌های گذشته روش‌های رشد هم‌بافته این ساختارها به بالاترین دقت ممکن در کنترل میزان ترکیبات، آرایش و شکل ظاهری رسیده است. همچنین دانشمندان توانستند به انواع متفاوتی از چینش هیبریدی در دو راستای متفاوت شعاعی و یا محوری [۲] برای محدودسازی حاملین [۳] و یا فوتون‌ها دست یابند. در این راستا نانوسیم‌های آرایش‌شده هسته-پوسته و یا هسته-چندپوسته گزینه‌های خوبی برای ساخت سلول‌های خورشیدی پربازده شدند. از طرف دیگر نانوسیم‌های متشکل از دیسک‌های کوانتومی متوالی درج‌شده در راستای محوری نانوسیم نیز نقش اساسی در ساختارهای اپتوالکترونیکی مانند آشکارسازها و دیودهای لیزری، حسگرهای اپتوشیمیایی و... داشته‌اند.

حالت‌های مختلفی از نوع چینش شامل دیسک کوانتومی تکی و یا دیسک کوانتومی‌های متعدد از آلیاژهای سه تایی $\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ توسط برخی از دانشمندان تجربی از جمله گروه‌های [۳، ۴] و دیگر دانشمندان از سال ۲۰۰۳ تا به حال طراحی و رشد داده شده است. علی‌رغم توجه زیاد دانشمندان در مقوله تجربی، محاسبات عددی چندانی از چیدمان‌های مختلف گزارش نشده است. هرچند برخی از دانشمندان چون ریگوتی^۱ (۲۰۱۰)، ژاکوبین^۲ (۲۰۱۳) توانستند وابستگی گذارهای نوری فوتولومینسانس با ضخامت دیسک‌های کوانتومی را با حل خودسازگار شرودینگر-پواسون محاسبه کنند [۵، ۶]، اما گزارش نتایج محاسباتی دقیق‌تر و کاربردی‌تر از مسائل به روز در این مقوله بشمار می‌آید. نیم‌رساناهایی مانند AlN ، InGaIn ، GaIn به علت داشتن یک جابه‌جایی بین زیرشبکه کاتیونی و آنیونی به عنوان مواد قطبی شناخته می‌شوند [۷]. در ساختارهای بدون تنش مکعبی زیرشبکه‌های کاتیون و آنیون به ترتیبی قرار گرفته‌اند که قطبش خالصی در ماده وجود ندارد. اما در جامدهای بلورین ورتزایت (مانند InN ، GaIn ، AlN) شکل‌گیری کاتیون و آنیون‌های زیرشبکه به صورتی است که یک جابه‌جایی نسبی نسبت به موقعیت ایده‌آل دارد که باعث ایجاد «قطبش خودبه‌خودی» در جامد بلورین

می‌شود که در ساختارهای نامتجانس بسیار پراهمیت است.

قطبش

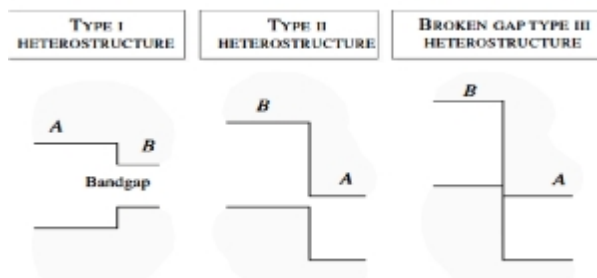
واژه قطبش به چگالی قطبش مواد دی الکتریک برمی‌گردد و به صورت یک ممان دوقطبی بر واحد حجم با واحد Cm^{-2} در SI تعریف و با نماد $\vec{P}$ مشخص می‌شود. برای ساختار ورتزایت از گروه III نیتريدی دو نوع قطبش پیزوالکتریک و خودبه‌خودی وجود دارد.

قطبش پیزوالکتریک

قطبش پیزوالکتریک به قطبش‌های الکتریکی القایی در اثر کشش‌های مکانیکی در مواد اطلاق می‌شود. در گروه III نیتريدی مانند GaIn اثرات قطبشی پیزوالکتریک قوی وجود دارد که از دیگر نیم رساناهای گروه III-V قوی‌تر است [۸].

قطبش خودبه‌خودی

قطبش خودبه‌خودی تنها در مقایسه یک اتم با اتم غیر تنشی دیگر قابل محاسبه است. بنابراین تنها اختلاف میزان قطبش در سطح جانبی بین دو ماده که در مجاورت یکدیگر قرار دارند اندازه‌گیری و جهت آن توسط قطبش ماده تعیین می‌شود. چنانچه جابجایی خالصی در یک زیر شبکه برخلاف دیگری باشد، یک میدان قطبشی ایجاد می‌شود که ناشی از یک بار قطبشی مثبت یا منفی است. در اغلب موارد بار قطبشی بر روی سطح آزاد توسط بارهای موجود در هوا خنثی می‌شود. این پدیده باعث قطبش در مواد می‌شود. چنانچه دو ماده با دو مقدار متفاوت از قطبش تشکیل یک ساختار مطابق شکل (۱) بدهند، یک بار قطبشی خالصی در وجه تماس شکل خواهد گرفت. در نیم رساناها این بار قطبشی باعث ایجاد میدان الکتریکی ($\vec{E} = \frac{\vec{P}}{\epsilon}$) می‌شود.



شکل ۱. انواع متفاوت قرار گرفتن گاف باندی در نیم رسانای A و B

بار سطحی $P_A - P_B$ و میدان ایجاد شده در وجه (شکل ۲) در طراحی بیشتر تجهیزات به صورت یک آلایندة عمل می‌کند (شکل ۲ و ۳). به عنوان مثال، در ساختار $\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ HFET، در اثر قطبش پیزوالکتریک در AlGaIn تحت تنش، یک بار صفحه‌ای ثابت در وجه تماس دو

ویژگی نانوسیم‌ها نسبت به نیم‌رساناهای تخت در افزونی قدرت تزویج آنها با نور است. این ساختارها بهتر گسیل می‌کنند و بهتر جذب را انجام می‌دهند. از دیدگاه اپتوالکترونیکی، مدولاسیون گاف باندی نقش عمده‌ای در انتخاب طول موج نور گسیلی و یا جذبی در ساختار دارد. اکثر مطالعات سال‌های اخیر در زمینه مهندسی گاف باندی این ساختارها صورت گرفته است. از آنجایی که در برخی موارد اندازه قطر نانوسیم برای مشاهده اثرات محدودسازی کوانتومی و جابه‌جایی ترازهای انرژی و شیفت پیک انرژی گسیلی ناشی از آن مناسب نبوده است؛ لذا ترکیباتی از چاه‌های کوانتومی را با آرایش‌های متفاوت درون نانوسیم‌ها رشد می‌دهند که به ساختار هیبریدی معروف هستند. این چاه‌های کوانتومی به طور مستقیم روی وجوه نانوسیم‌ها یا در امتداد محور تشکیل می‌شوند و چپش مناسب را برای ایجاد اثرات محدودیت کوانتومی ایجاد می‌کنند. نمونه‌ای از این چپش‌ها در شکل (۴) نشان داده شده است [۲۵].

Confined dimensions	Quantum structures	Sketch
1D	Quantum wells, QWs (2D)	
2D	Quantum wires, QWRs (1D)	
3D	Quantum dots, QDs (0D)	

شکل ۴. مقایسه نانو سیم با دیگر ساختارهای کوانتومی

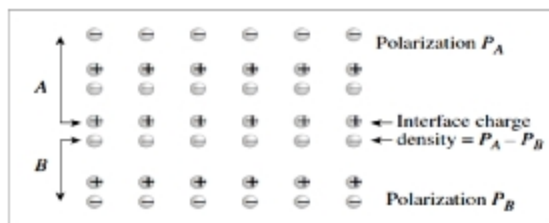
لومینسانس

واژه لومینسانس را اولین بار ایلهارت ویدمن در سال ۱۸۸۸ خلق کرد که به معنی انتشار نور سرد است. به طور کلی گسیل از مواد مختلف در دو دسته فروختگی^۱ و لومینسانس طبقه‌بندی می‌شود.

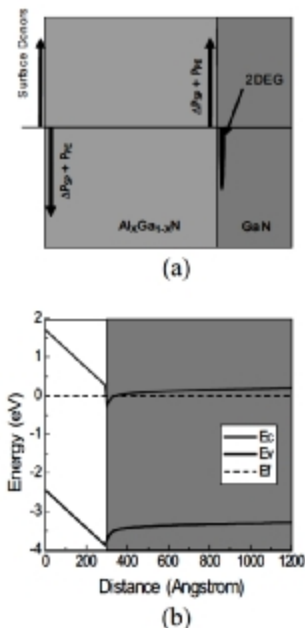
گسیل نور از اجسامی که نور آنها تنها به علت دمای بالای آنها است را فروختگی می‌نامند که یک نمونه آشنای آن تابش جسم سیاه است. از دیگر نمونه‌ها می‌توان به نور قرمز ساطع‌شونده از فلزی درون کوره، نور سفید رشته تنگستن در لامپ‌های معمولی و یا نور حاصل از خورشید و ستارگان اشاره کرد.

هر نوع گسیل دیگری که عاملی به جز دما داشته باشد در دسته لومینسانس جای می‌گیرد. بنابراین، عبارت لومینسانس بیانگر باز ترکیب الکترون با حفره در مواد نیم‌رسانا خواهد بود. از

ماده ایجاد شده و باعث ناپیوستگی در قطبش سطحی در وجه شده است (شکل ۳). بار مثبت خالص در اتصال AlGaIn/GaN به صورت چگالی گاز الکترونی دو بعدی معرفی می‌شود. در شکل (۳) این پدیده با یک شیب از GaN به AlGaIn مشخص شده است. بنابراین بار قطبش القایی بر ناحیه مدرج شده پهن می‌شود. چگالی حاملین قطبش القایی ρ_{π} توسط معادله $\rho_{\pi} = \nabla \cdot \vec{P}$ محاسبه می‌شود که در این معادله $\vec{P}$ قطبش کل در ماده است. قطبش القایی بارها می‌تواند توسط یک گیت در ساختار مدوله شود که آن را یک FET قطبشی-آلاینده یا PolFET می‌نامند [۷].



شکل ۲. نمایش تشکیل چگالی بار در وجه تماس دو ماده قطبی [۳۱]



شکل ۳. حرکت صفحه‌های دوبعدی از الکترون‌های القا شده توسط میدان‌های الکتریکی در ساختار نامتجانس AlGaIn/GaN. (الف) توزیع بار و (ب) ساختار باندی [۷].

نانوسیم‌ها

اهمیت مطالعه و ساخت نانوسیم‌های نیم‌رسانا در کاربردهای فراوان آنها در افزاره‌های پیشرفته‌ای از قبیل دیودهای نورگسیل و لیزرها و افزاره‌های پیشرفته اپتوالکترونیکی مانند سنسورهای نوری، ترانزیستورهای با تحریک‌پذیری بالا، سلول‌های خورشیدی و افزاره‌های الکترودمایی است. مهم‌ترین

حاملین و هم شامل فوتون‌های نوری می‌شود. در مطالعات اخیر، گروه تحقیقاتی جاذاک و همکارانش در سال ۲۰۱۴ کار روی مکانیسم دوپینگ و کنترل حاملین در نانوسیم‌های GaAs/AlAs و بررسی عوامل مختلف آن را ادامه دادند. آن‌ها با بیان طرح تجربی برای ساخت نانوسیم‌ها و دوپ غیر عمدی آنها با اتم‌های کربن به عنوان ناخالصی به مقایسه نتایج تجربی و تئوری طیف فوتولومینسانس در دو ساختار نانوسیم هسته-پوسته و هسته-چندپوسته پرداختند [۱۵]. مواردی چون گذارهای مختلف پذیرنده‌ها و دهنده‌ها و گذارهای مربوط به اکسایتون مقید و آزاد را با مطالعه طیف نورزایی بررسی کردند و با اشاره به محدودسازی کوانتومی حاملین در هسته برای نانوسیم‌های هسته-چندپوسته، مربوط به نمونه خاص چاه کوانتومی (QW) با ضخامت ۱۵-۲۰ nm انرژی گسیلی را در محدوده ۵۲۰-۵۲۸/۷۱ eV مشاهده کردند. آنها سپس به طور خاص به بررسی طیف فوتولومینسانس با تغییرات اکسایتونی، دما، میدان مغناطیس پرداخته و همچنین رابطه کلی برای سنجش نورزایی بیان کردند.

ماریا تچرنیچوا و همکارانش با الهام از کارهای جی. ریستیک^۱ (۲۰۰۳) [۱۶]، با ساخت نمونه‌های متنوعی از هیبریدهای نانوسیم-دیسک کوانتومی از مواد نیتربیدی [۴]، به مطالعه طیف فوتولومینسانس پرداختند. قسمت اعظم کار ایشان به صورت تجربی و در زمینه ساختار دوم که همان ساختار دیسک کوانتومی متناوب سوار بر محور رشد بود.

محاسبات لومینسانس در نیم‌رساناهای هیبریدی

محاسبات لومینسانس در نیم‌رساناهای هیبریدی و قوانین حاکم بر آن [۱۷]، بر اساس محاسبه ترازهای مجاز و احتمال پر بودن آنها در باند رسانش و خالی بودن آنها در باند ظرفیت است. میزان وجود حاملین آزاد و حاملین ناشی از یونیزه شدن تعداد آلاینده‌ها در سیستم و همچنین نحوه توزیع آنها باعث ایجاد پتانسیلی در ساختار خواهد شد، این پتانسیل که هارتری نام دارد با اثر گذاشتن روی ساختار باندی نامتجانس نانوسیم هیبریدی نیم‌رسانا باعث تغییراتی در موقعیت تراز فرمی و نحوه توزیع حاملین می‌شود. یافتن پاسخی همگرا برای مقادیر انرژی فرمی و هر یک از ترازها روندی پیچیده در محاسبات عددی دارد که گاهی با انتخاب روش‌های نامناسب به مسئله‌ای لاینحل تبدیل می‌شود. تغییرات دما، میدان مغناطیسی و گذارهای اکسایتونی نیز بر طیف فوتولومینسانس در نانوسیم‌های هیبریدی تأثیر می‌گذارد که بررسی آن نیاز به

آن جهت که فرآیند لومینسانس نیازمند دماهای بالا نبوده و در دماهای معمول و نسبتاً پایین اتفاق می‌افتد، به نور ساطع شده، نور سرد هم گفته می‌شود. منظور از نور سرد این است که کمتر از ۲۰ درصد تابش حرارتی تولید می‌شود و لومینسانس یا نور سرد نباید با فلورسانس، فسفورانسانس و یا شکست نور اشتباه شود. در مکانیسم تولید نور سرد ممکن است دسته‌ای از واکنش‌های بینابینی نیز وجود داشته باشد؛ اما واکنشی که تولید نور می‌کند واکنش نهایی مسیر است که به آن «واکنش منتشرکننده نور» می‌گویند. فرایندهای نوری در جامدات اساساً بر پایه درک مفاهیم اندرکنش نور با ماده با در نظر گرفتن نقص‌ها، یون‌ها، الکترون‌ها، ناخالصی‌ها و دیگر عوامل موثر در آن است [۹]. به طور کلی لومینسانس گسیل نور به دلیل گذار یک الکترون برانگیخته به سمت ترازهای پایین‌تر است که این مورد در نیم‌رساناها به صورت بازترکیب یک الکترون با حفره بیان می‌شود؛ به این صورت که گذار یک الکترون موجود از باند رسانش به تراز پایه خالی موجود در باند ظرفیت را شامل می‌شود. مقدار انرژی اضافی الکترون به صورت یک فوتون ساطع می‌شود. به هر جسمی که توانایی درخشندگی از خود نشان دهد لومینسنت گویند. لومینسانس‌های معدنی از شبکه میزبان، نقص‌ها و آلاینده‌ها تشکیل شده‌اند. آلاینده‌ها، ناخالصی‌هایی هستند که نقش فعال‌سازی و یا حساس‌سازی را ایفا می‌کنند.

عبارت‌های مانند فوتولومینسانس، الکترولومینسانس، رادیولومینسانس و تریبولومینسانس [۱۰]... نیز وجود دارد که مشخص‌کننده روش‌های مختلف تحریک الکترون است [۱۱]، [۱۲]. در این مقاله انواع بازترکیب نوری و غیر نوری و همچنین انواع لومینسانس بدون توجه به عامل تحریک و تنها با بررسی میزان تابش ناشی از بازترکیب‌های ممکن محاسبه و نشان داده شده است [۱۳، ۱۴].

گسیل از مواد مختلف در دو دسته افروختگی و لومینسانس طبقه‌بندی می‌شود.

خواص نوری نانوسیم‌ها

آنچه که باعث ایجاد خواص نوری منحصر به فرد در نانوسیم‌ها می‌شود، هندسه خاص آنها است که آنها را به صورت یک رشته باریک تبدیل می‌کند. با تنظیم ضخامت نانوسیم در محدوده سیم کوانتومی، نور گسیلی با استفاده از حذف بازتاب‌های داخلی بسیار روشن خواهد بود. به همین ترتیب نانوسیم‌ها می‌توانند قطعات ایده‌آلی برای دیودهای نورگسیل با توانایی نورهای درخشان و چشمه‌های تک فوتونی باشند. به عبارتی روشنایی‌ها با تغییر در ساختار و تغییر در گاف باندی آن با هدف ایجاد محدودسازی بهتر انجام می‌شود که این محدودسازی هم شامل

صورت زیر خلاصه می شود [۱].

(۱)

$$W_{abs} = 2\pi / \hbar | \langle b | H' | a \rangle |^2 2\delta(E_b - E_a - \hbar\omega)$$

که در آن $E_b > E_a$ در نظر گرفته شده است و هامیلتونی اندرکنش نور با ماده نیز به صورت ترکیبی از هامیلتونی بدون اختلال H_0 و هامیلتونی اختلالی ناشی از حضور نور H' به صورت زیر تعریف می شود [۱]:

(۲)

$$H \approx \frac{p^2}{2m_0} + V(r) - \frac{e}{2m_0} (\vec{P} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{P}) + \frac{e^2 A^2}{2m_0} \approx H_0 + H'$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V(r)$$

$$H' = -\frac{e}{2m_0} \vec{A} \cdot \vec{P}$$

در این روابط $\vec{P} = (\hbar/i) \vec{\nabla}$ است و از پارامتر آخر به علت کوچکی صرف نظر شده است. مجموع گذارهای به سمت بالا در واحد حجم در واحد زمان $s^{-1} cm^{-3}$ با شمارش احتمال پر بودن تراز a و خالی بودن تراز b به صورت زیر تعریف می شود:

(۳)

$$R_{(a \rightarrow b)} = \frac{2}{V} \sum_{K_a} \sum_{K_b} \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{ba}| \delta(E_b - E_a - \hbar\omega) f_a (1 - f_b)$$

در این رابطه جمع روی ترازهای انرژی اولیه و نهایی است و توزیع فرمی-دیراک f_a معرف احتمال وجود الکترون تراز a و $(1 - f_b)$ احتمال خالی بودن تراز b خواهد بود. عناصر ماتریسی H'_{ba} نیز طبق رابطه زیر تعریف می شود:

(۴)

$$H'_{ba} = \langle b | H'(r) | a \rangle = \int \psi_b^*(r) H'(r) \psi_a(r) d^3(r)$$

با استفاده از رابطه $\delta(x) = \delta(-x)$ و $|H'_{ab}| = |H'_{ba}|$ نرخ گسیل خالص به صورت زیر خواهد بود:

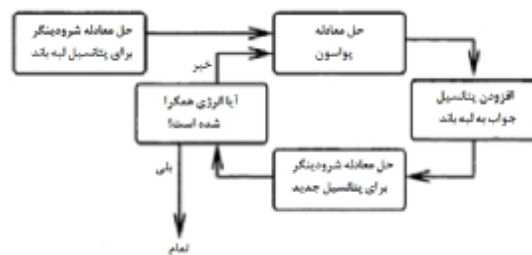
(۵)

$$R = R_{b \rightarrow a} - R_{a \rightarrow b} = \frac{2}{V} \sum_{K_a} \sum_{K_b} \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{ba}| \delta(E_a - E_b - \hbar\omega) (f_a - f_b)$$

در بررسی این نوع گذارها عامل تحریک الکترون مد نظر نیست. و با نرخ گذار خودبه خودی می توان آن را محاسبه کرد. اما چنانچه در گذار نوع تحریک اعم از نوری، الکتریکی و... در انواع فوتولومینسانس، الکتrolومینسانس و... مد نظر باشد، باید نرخ گذار از رابطه مربوط به گذار تحریکی محاسبه شود [۱].

اعمال روابط و مقایسه با نتایج تجربی دارد که موضوع این مقاله نیست و شرایط آزمایشگاهی در نظر گرفته شده در محاسبات این مقاله متناسب با آزمایش های مشابه بدون اعمال میدان مغناطیسی و با صرف نظر از گذارهای اکسایتونی و در دمای اتاق انجام شده است.

یکی از روش های متداول برای حل، خودسازگار شرودینگر-پواسون است که با جای گذاری جواب های دو معادله در یکدیگر پاسخ همگرای معادلات را محاسبه می کند. درواقع، با حل معادله شرودینگر توابع موج مجاز و انرژی های مربوط به آن را محاسبه نموده و بعد از انجام محاسبات اساسی در معادلات پواسون میزان کج شدگی پتانسیل ناشی از این توابع موج را محاسبه می کند. سپس با اعمال تغییرات در تابع پتانسیل چرخه ادامه پیدا می کند. شکل زیر الگوریتم حل خودسازگار شرودینگر-پواسون را نشان می دهد [۱۸]. محاسبه دقیق انرژی فرمی متناسب با چگالی بار الکتریکی دوبعدی موجود در سیستم و همچنین محاسبه میزان کج شدگی باند و تاثیر آن روی تعداد ترازهای انرژی مجاز ناشی از جابه جایی تراز فرمی، از نقاط قوت استفاده از روش خودسازگار شرودینگر-پواسون است که تا همگرایی دقیق جواب ها ادامه پیدا می کند. تعیین ضریب دقت اعداد محاسبه شده معیاری برای اتمام محاسبات و اعلام نتایج خروجی است که گاهی می تواند نقطه ضعف این روش نیز به حساب آید.



شکل ۵. الگوریتم از حل خودسازگار شرودینگر-پواسون [۱۸]

اندرکنش الکترون- فوتون در فرایندهای جذب و گسیل

بیان تئوری کوانتومی نور توسط پلانک در سال ۱۹۰۰ و توجیه پدیده فتوالکتریک توسط اینشتین در سال ۱۹۰۵، پایه و اساس توضیح بسیاری از فرایندهای اندرکنش نور با ماده در نیم رساناها شد. مطابق با این نظریه هر فوتون فرودی می تواند توسط یک الکترون موجود در تراز پایه جذب شده و آن را به تراز بالاتر ببرد. از طرفی الکترون در تراز برانگیخته نیز می تواند با گسیل یک فوتون به تراز پایه برگردد. نرخ گذار از تراز پایه E_a به تراز برانگیخته E_b برای جذب یک فوتون توسط یک الکترون توسط رابطه طلایی فرمی و هامیلتونی (H) اندرکنش نور با ماده با استفاده از تئوری اختلال وابسته به زمان به

مقطع با توجه به تقارن موجود در مسئله شعاع سطح مقطع نانوسیم در سیستم استوانه‌ای و یا ترکیبی از دو مولفه (x,y) خواهد بود که در مسائل مورد نظر ما سیستم استوانه‌ای مناسب‌تر است. $m_{e(h)}^{\parallel}$ و $m_{e(h)}^{\perp}$ جرم‌های موثر وابسته به مختصات الکترون و حفره در امتداد موازی و عمود بر محور $\vec{z}$ هستند. V پتانسیل محدودکننده سیستم است که با استفاده از پتانسیل‌های لبه باندی مشخص می‌شود. V_H پتانسیل هارتری ناشی از حاملین آزاد و آلاینده‌های ساکن در سیستم است و V_{XC} معرف پتانسیل همبستگی است که از آن صرف نظر شده است. با عدددهی به روابط معادله شرودینگر به صورت معادله ماتریسی سه قطری زیر تبدیل می‌شود:

$$\begin{bmatrix} -\left\{(\delta z)^2 U + \frac{1}{\lambda(z+\frac{\delta z}{2})} + \frac{1}{\lambda(z-\frac{\delta z}{2})}\right\} & \frac{1}{\lambda(z+\delta z)} & 0 \\ \frac{1}{\lambda(z-\delta z)} & \ddots & \ddots \\ 0 & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \psi(z) = \begin{pmatrix} \lambda(z+\delta z) \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} - \varepsilon(\delta z)^2 \psi(z) \quad (8)$$

اکنون معادله شرودینگر به یک معادله ویژه مقداری $H\psi=E\psi$ تبدیل شده است که با محاسبه ویژه مقادیر و ویژه بردارهای آن در روش‌های محاسباتی می‌توان مقادیر مجاز انرژی و توابع موج نظیر آنها را محاسبه کرد. در گزارش اعداد محاسبه شده توجه به ضرایب بی‌بعدسازی که قبلاً اعمال شده است ضروری است. حل معادله پواسون و محاسبه پتانسیل هارتری نیز مطابق با روابط زیر و روش تفاضل متناهی (پیوست پ) قابل محاسبه است.

$$\nabla^2 \varphi = \frac{-\rho(z)}{\varepsilon_0} \quad (9)$$

$$V_H = -|e|\varphi(z) \quad (10)$$

آنچه که در حل معادله پواسون مهم است محاسبه پتانسیل هارتری V_H ناشی از چگالی بار کل $\rho(z)$ است [۲۴].

نانوسیم‌های هیبریدی دیسک کوانتومی

سامانه نیم رسانای هیبریدی نانوسیم- دیسک کوانتومی از کنار هم قرار دادن دیسک‌های کوانتومی درون یک بستر در حین رشد نانوسیم ایجاد می‌شود. در این نانوسیم‌ها دو ماده نامتجانس با گاف باندی متفاوت به طور متوالی پشت سر هم قرار می‌گیرند و در ساختار باندی آنها مجموعه‌ای از چاه و سدهای کوانتومی متوالی تشکیل خواهد شد. از آنجا که مواد انتخابی از مواد نیم‌رسانا هستند این اتفاق به طور متقابل هم برای باند ظرفیت و هم برای باند رسانش رخ می‌دهد. با توجه به کوچک بودن ابعاد نانوسیم‌ها و پیدایش اثرات اندازه کوانتومی در آنها ترازهای انرژی گسسته خواهد بود. با توجه به تراز فرمی و چگالی احتمال وجود ذرات که از توابع موج ناشی

حل خودسازگار معادله شرودینگر و پواسون

اولین مرحله در محاسبه طیف لومینسانس، حل خودسازگار معادلات شرودینگر-پواسون و یافتن پاسخ صحیحی از توابع موج و ترازهای انرژی یک سیستم توسط معادله شرودینگر است. تعریف لایه‌های نامتجانس متناوب (معرف چیدمان نانوسیم و...) در سیستم حل معادلات با توجه به پتانسیل‌های لبه باندی آنها انجام خواهد شد. در حل این معادله توجه به پتانسیل‌های حاکم بر ساختار نیم‌رسانا در ساختارهای نامتجانس و شیوه تعریف ساختارهای متفاوت به صورت پیوسته بسیار حائز اهمیت است [۱۹، ۲۰]. در بررسی نانوسیم‌های هیبریدی دیسک کوانتومی ساختار مانند یک زنجیره از چاه‌های کوانتومی متناوب در مجاورت یکدیگر است، در این حالت نمی‌توان چاه‌ها را به صورت تک چاه بررسی کرد؛ بلکه باید تاثیر هر چاه روی چاه‌های مجاور مطالعه شود؛ چرا که با توجه به فاصله چاه‌ها از یکدیگر و اثر تونل‌زنی مابین آنها، تابع موج قابل محاسبه در این گونه ساختار به صورت توابعی پیوسته با نفوذ در چاه‌های مجاور خواهد بود. استفاده از تقارن در مسئله برای کاهش ابعاد حل مسئله و همچنین استفاده از تقریب‌های مناسب در حل مسئله نقش موثری در کاهش خطای برنامه‌نویسی به علت تکرار دفعات خواهد داشت. حل معادله شرودینگر در نانوسیم نیم‌رسانای مورد نظر با استفاده از تقریب تابع پوش در تقریب تک باند و تقریب جرم موثر به صورت رابطه زیر است:

(۶)

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r}{m_{e(h)}^{**}(\vec{r})} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V_{ks}(\vec{r}) \right] \psi_{n(m)}^{e(h)}(\vec{r}) \\ & = \varepsilon_{r_{n(m)}}^{e(h)} \psi_{n(m)}^{e(h)}(\vec{r}) \end{aligned}$$

(۷)

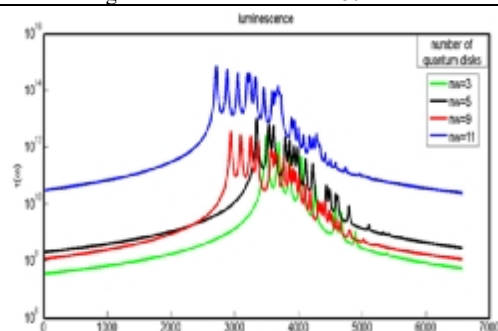
$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla_z \left(\frac{1}{m_{\perp}^{*}(\vec{r})} \nabla_z \right) + V_{ks}(\vec{z}) \right] \psi_{n(m)}^{e(h)}(\vec{z}) \\ & = \varepsilon_{z_{n(m)}}^{e(h)} \psi_{n(m)}^{e(h)}(\vec{z}) \end{aligned}$$

که در آن V_{ks} پتانسیل کوهن-شم است که معرف پتانسیل‌های موجود در سیستم است و به صورت زیر تعریف می‌شود:

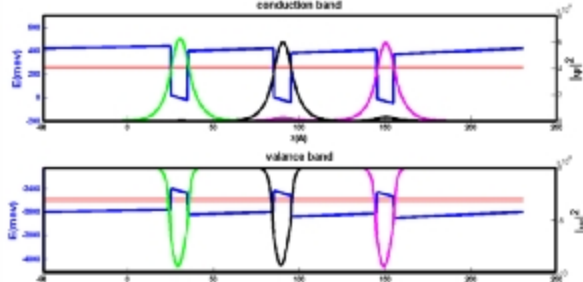
$$V_{ks}(\vec{r}, \vec{z}) = V(\vec{r}, \vec{z}) + V_H(\vec{r}, \vec{z}) + V_{XC}(\vec{r}, \vec{z})$$

که در معادلات $\varepsilon_{z_{n(m)}}^{e(h)}$ ویژه مقادیر مجاز الکترون، $\psi_{n(m)}^{e(h)}(z)$ ویژه توابع مجاز الکترون، $\varepsilon_{r_{n(m)}}^{e(h)}$ ویژه مقادیر انرژی مجاز حفره و $\psi_{n(m)}^{e(h)}(r)$ ویژه توابع مجاز برای الکترون حفره در راستای محور $\vec{z}$ و $\vec{r}$ هستند. $\vec{r}$ با توجه به ساختار نانوسیم تعریف می‌شود. برای نانوسیم‌های نیتریدی این سطح

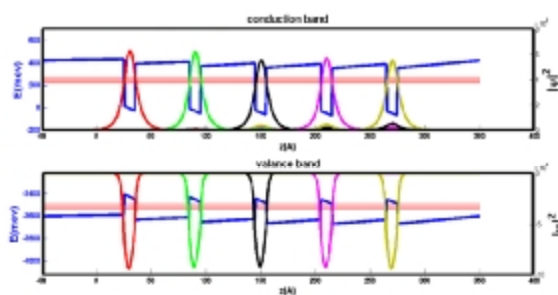
	3	5	9*	11**
E(meV)	ϵ_{zn}^e	ϵ_{zn}^h	ϵ_{zn}^e	ϵ_{zn}^h
Description	247.86	-3485.43	223.84	-3493.36
$L_w = 10(\text{\AA})$	255.23	-3502.64	230.51	-3513.97
$L_h = 25\text{\AA}$	278.18	-3515.50	231.97	-3527.16
$L_{dope} = 5\text{\AA}$			243.61	-3533.16
$\rho_D = 1.44$				-3534.92
$\times 10^{18} 1/\text{cm}^3$		272.62	183.25	-3577.49
height	280	400	640	760



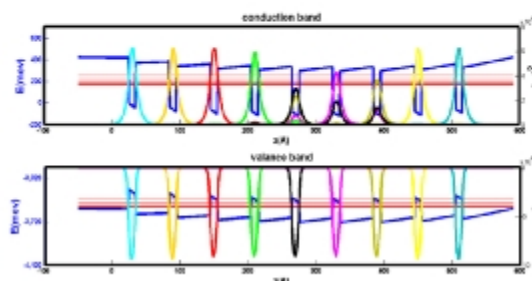
شکل ۶. گسیل لومینسانس از ساختار هیبریدی نانوسیم-دیسک کوانتومی شامل ۳، ۵، ۹ و ۱۱ دیسک GaN درج شده در AlGaIn



الف



ب



پ

شکل ۷. توابع موج و ساختار باندی برای نانوسیم هیبریدی با ۳، ۵ و ۹ دیسک کوانتومی

می شود، الکترون ها در ترازهای باند رسانش و حفره ها در ترازهای باند ظرفیت قرار می گیرند. اثرات محدودسازی بار الکتریکی در این نوع از ساختار به علت هدایت حاملین به درون چاه ها به بازترکیب بهتر الکترون و حفره کمک خواهد کرد. از طرفی به دلیل متفاوت بودن ثابت شبکه و ضریب شکست در این ساختارهای نامتجانس، این ساختارها ابزار مناسبی برای محدودسازی و هدایت نور نیز خواهند بود [۲۳].

محاسبه لومینسانس و عوامل موثر در آن

در این قسمت لومینسانس گسیلی ناشی از بازترکیب های باند به باند در نانوسیم در نظر گرفته شده محاسبه می شود و تاثیر عوامل مختلفی چون تعداد دیسک های کوانتومی، ضخامت و فاصله بین آنها و همچنین تعداد دهنده های یونیزه شده بررسی خواهد شد. تمام این تغییرات در راستای امتداد محور Z است و پارامترها در راستای شعاعی با مقادیر ثابت $r_b = 9\text{nm}$ و $r_w = 4\text{nm}$ در نظر گرفته شده اند.

اثر افزایش تعداد دیسک های کوانتومی

در ابتدا گسیل لومینسانس از نانوسیم های دارای ۳، ۵، ۹ و ۱۱ دیسک کوانتومی را بررسی می کنیم شکل (۳). در تمام این حالت ها فاصله بین دو دیسک متوالی ۲/۵ نانومتر و ضخامت تمام دیسک ها ۱ نانومتر در نظر گرفته شده است. مقدار آرایش نوع n برای تمام این نانوسیم ها است. با توجه به کنار هم قرار گرفتن تعداد متفاوتی از دیسک های یکسان در فاصله های یکسان ارتفاع این نانوسیم ها برای حالت های دارای ۳، ۵، ۹ و ۱۱ به ترتیب ۲۸۰، ۴۰۰، ۶۴۰ و ۷۶۰ آنگستروم خواهد بود. نتایج مربوط به محاسبه ترازهای انرژی در جدول (۱) و توابع موج و ساختار باندی مربوط به هر کدام از ساختارها در شکل (۴) قابل مشاهده است. با محاسبه و گسیل لومینسانس از این سیستم، می توان دریافت که اختلاف انرژی باند رسانش و ظرفیت در اولین گسیل مجاز به ترتیب برای ۳، ۵، ۹ و ۱۱ دیسک کوانتومی به ترتیب ۳۷۳۳/۲۹، ۳۷۱۷/۲، ۳۶۷۲/۱۴، ۳۶۴۷/۵۳ میلی الکترون ولت و در حال کاهش است. با افزایش تعداد دیسک های کوانتومی تعداد گذارهای نوری لومینسانس افزایش می یابد؛ اما از انرژی آنها کاسته می شود. که به دلیل کاهش فاصله اولین تراز باند رسانش و ظرفیت است. از طرفی با افزایش تعداد دیسک های کوانتومی تعداد پیک های مربوط به گذارهای نوری افزایش یافته است.

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.

(۱۳)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{m_{e(h)}^*} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + V_{KS}(\vec{\rho}) \right] \psi_{n(m)}^{e(h)}(\vec{\rho}) = \varepsilon_{r_{n(m)}}^{e(h)} \psi_{n(m)}^{e(h)}(\vec{\rho})$$

در این رابطه $\vec{\rho} = (x, y)$ معرف شعاع محیطی در سطح مقطع نانوسیم، $\psi_{n(m)}^{e(h)}(\rho) (\varepsilon_{r_{n(m)}}^{e(h)})$ توابع موج و ترازهای انرژی مجاز در کل سیستم مدل شده هستند $m_{e(h)}^*$ مقدار جرم موثر الکترون و حفره را در امتداد عمود بر راستای محور Z را نشان می‌دهد.

مقادیر محاسبه شده از رابطه (۱۱) برای به‌دست آوردن چگالی بار کل، مطابق روابط (۱۲) الی (۱۵) زیر استفاده می‌شود. با جای‌گذاری معادله (۳-۳۳) در معادله پواسون (۳-۲۴) می‌توان پتانسیل هارتری که معرف میزان کج‌شدگی ساختار باند است را محاسبه کرد [۲۱، ۲۲].

$$n_e(\vec{\rho}) = \sum_n \left| \psi_n^e(\vec{\rho}) \right|^2 \frac{k_B T m_e^*}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + e^{\frac{\mu - E}{k_B T}} \right] \quad (14)$$

$$n_h(\vec{\rho}) = \sum_n \left| \psi_n^h(\vec{\rho}) \right|^2 \frac{k_B T m_h^*}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + e^{\frac{E - \mu}{k_B T}} \right] \quad (15)$$

(۱۶)

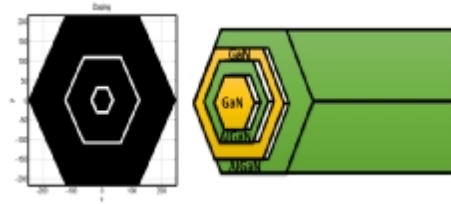
$$\rho_{tot}(\vec{\rho}) = e [n_h(\vec{\rho}) - n_e(\vec{\rho}) + \rho_D(\vec{\rho}) - \rho_A(\vec{\rho})] + \sigma (= \nabla \cdot \vec{P})$$

$$\nabla_{\vec{\rho}} \left[\varepsilon_{\vec{\rho}} \nabla_{\vec{\rho}} V_H(\vec{\rho}) \right] = -\rho_{tot}(\vec{\rho}) / \varepsilon_0 \quad (17)$$

قطبش یکی از موارد مهم در مواد نیتریدی 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 عدم جفت‌شدگی ساختار شبکه هنگام در کنار هم قرار گرفتن ساختارهای نیتریدی است. هر چند قطبش یکی از مشخصه‌های مهم در مواد نیتریدی است؛ اما در ساختارهای خاصی از نانوسیم‌ها این اثر به طور کلی حذف می‌شود. ساختارهای هسته-پوسته یکی از انواع چینش‌ها هستند که باعث می‌شوند یکی از مشخصه‌های اصلی مواد نیتریدی، یعنی قطبش آن از معادلات حذف شود. دلیل آن را باید در مطالعه ساختار ورتزایت این مواد جستجو کرد. هنگامی که مواد در راستای صفحه‌های غیر قطبی m حول محور رشد و با تقارن

مدل‌سازی نانوسیم نیم‌رسانای هسته-چندپوسته غیرقطبشی

در شکل (۸) یک نمونه از نانوسیم نیم‌رسانای هسته-چندپوسته به طور شماتیک مدل‌سازی شده است. در این نمونه لایه‌های مختلف مواد نیتریدی $Al_{0.3}Ga_{0.7}N/GaN$ با تقارن شعاعی حول محور چیده شده‌اند و دو مکان ثابت آلایدگی از نوع n در اطراف محور و در بین لایه‌های مختلف در نظر گرفته شده است. این مکان آلایدگی در طول مقاله ثابت فرض شده است. در این مقاله چینش‌های مواد مختلف در امتداد صفحات غیر قطبشی از ساختار ورتسایت از مواد نیتریدی در نظر گرفته شده است که آن را از محاسبات دیگر متمایز می‌کند.



شکل ۸. مدل نانو سیم هسته-چندپوسته (نمودار رنگی)، تعیین محل آلایش (نمودار سیاه و سفید)

برای محاسبه لومینسانس ناشی از این چینش از رابطه (۹) استفاده می‌شود:

$$(11)$$

$$\tau(\omega) \propto$$

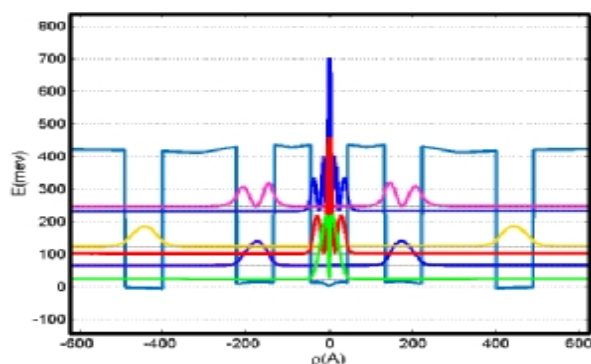
$$\sum_{nm} |s_{nm}|^2 \int \frac{dk}{2\pi} f^e(\varepsilon_{nk}^e, T) (1 - f^h(\varepsilon_{mk}^h - \mu, T)) \times \Gamma(\varepsilon_{nk}^e - \varepsilon_{mk}^h - \hbar\omega - \gamma)$$

که در آن $s_{nm} = \int d\vec{r} \psi_n^e(\vec{\rho}) \psi_m^h(\vec{\rho})$ است. s_{nm} معرف تابع همپوشانی بین تراز m باند رسانش و تراز m باند ظرفیت، $f^{e(h)}$ تابع پرشدگی فرمی الکترون (حفره) در دمای اتاق، Γ تابع پهن‌شدگی لورنتس است که میزان پهن‌شدگی پدیده شناختی آن، γ ، معادل meV قرار گرفته است. اساس و پایه محاسبات برای به‌دست آوردن اطلاعات اولیه و درج آن در رابطه (۱۰) بر پایه تعریف پتانسیل کوهن-شم مطابق با رابطه (۱۱) و درج آن در معادلات خودسازگار شرودینگر-پواسون است.

$$V_{KS}(\vec{\rho}) = V(\vec{\rho}) + V_H(\vec{\rho}) + V_{XC} \quad (12)$$

در این معادله پتانسیل ساختار باند (V)، پتانسیل هارتری (V_H) و پتانسیل ناشی از همبستگی جفت‌شدگی (V_{XC}) که در این مقاله از آن صرف نظر شده است، ساختار مدل را تعریف

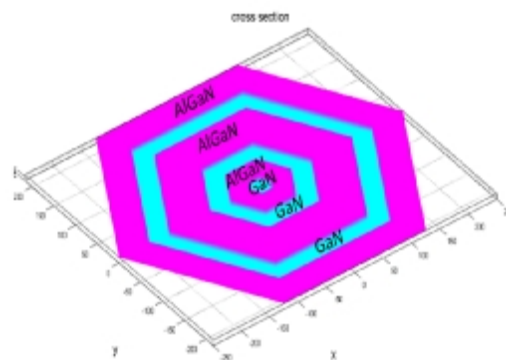
کج شدن لبه آن می‌شود. از تناظر بین شکل (۱۰) و شکل (۱۱) ارتباط بین توابع موج و احتمال حضور بارهای آزاد در لایه مرکزی GaN را به خوبی ملاحظه کرد. آنچه که از شکل (۱۰) انتظار می‌رود این است که به دلیل محاسبه شش تراز مجاز در باند رسانش بتوانیم شاهد شش پیک در طیف لومینسانس باند به باند باشیم. این در حالی است که طیف لومینسانس محاسبه شده در شکل (۱۲) 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. درواقع پیک‌های مربوط به گذار مرکزی به علت داشتن چگالی گاز الکترونی دوبعدی بیشتر، از احتمال گذار بیشتری برخوردار بوده و در نتیجه باز ترکیب‌های بیشتری در آن اتفاق خواهد افتاد؛ بنابراین این پیک بلندتر خواهند بود. در ادامه با تغییر در میزان آلایش 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 ۳۲، ۷۷، ۱۱۰، ۱۲۲، ۲۴۰ و ۲۵۷ میلی الکترون ولت و انرژی فرمی ۵۷ میلی الکترون ولت و با انتخاب $\rho_D = 1.89 \times 10^{19} (1/cm^3)$ مقادیر مجاز برای باند رسانش به ترتیب ۳۰، ۶۹، ۱۰۸، ۱۱۴، ۲۳۸ و ۲۴۸ میلی الکترون ولت و انرژی فرمی ۵۴ میلی الکترون ولت است. با تکرار محاسبات لومینسانس برای این مقادیر متفاوت آلایش مشاهده شد که علی‌رغم تغییر در میزان کج‌شدگی‌های لبه باند تغییری در انرژی گسیلی وجود نداشته است.



شکل ۱۰. کج‌شدگی ساختار باند، شش تراز انرژی و توابع موج متناسب با هر تراز که با خطوط رنگی مشخص شده است.

کامل رشد می‌کنند هر دو قطبش خودبه‌خودی و پیزوالکتریک صفر می‌شوند. به این ترتیب آخرین قسمت از معادله (۱۴) صفر است و چگالی بار قطبشی در معادلات وارد نمی‌شود.

همچنین نمونه خاصی از نانوسیم با یک هسته و پنج پوسته مطابق شکل (۸) بررسی شده است. در این نمونه هسته از جنس GaN و پوسته‌ها به صورت لایه‌های متناوبی از GaN/AlGaN هستند. میزان آلایدگی در نظر گرفته شده در سیستم $\rho_D = 1.44 \times 10^{19} (1/cm^3)$ در موقعیت شعاع‌های ۲ و ۷ نانومتری از محور و با ضخامت ۵ nm مطابق با شکل (۹) در نظر گرفته شده است.



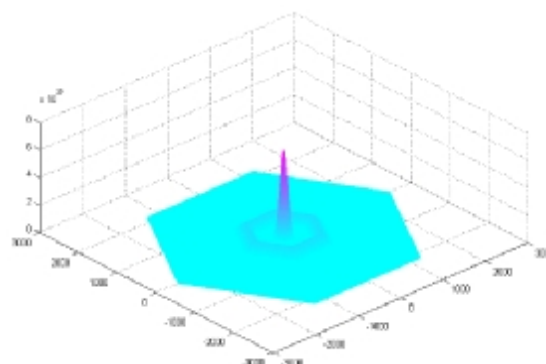
شکل ۹. مدل نانو سیم هسته-چند پوسته (رسم در سیستم قطبی)

محاسبات خودسازگاری شرودینگر-پواسون برای کل ساختار به صورت منسجم در تکرارهای متوالی طبق یک الگوریتم منظم، تا دستیابی به شرط همگرایی ادامه پیدا می‌کند. پاسخ معادلات بعد از همگرایی را می‌توان در کج‌شدگی ساختار باند، ترازهای انرژی و توابع موج مطابق شکل (۱۰) مشاهده کرد. همان طور که در این شکل نشان داده شده است، شش تراز مجاز برای قرار گرفتن الکترون‌ها در باند رسانش وجود دارد و توابع موج مربوط به هر تراز که برای مقایسه بهتر روی خط تعیین کننده سطح انرژی مجاز رسم شده است. محاسبات مربوط به چگالی احتمال وجود حاملین (الکترون‌ها) در این شش تراز انرژی میزان شدت لومینسانس و تغییرات ساختار باندی را نشان می‌دهند. در شکل (۱۱) چگالی بار آزاد الکترونی دوبعدی در باند رسانش نشان داده شده است. این بارها که نتیجه یونیزه شدن آلاینده‌ها در سیستم هستند در چاه‌ها قرار می‌گیرند.

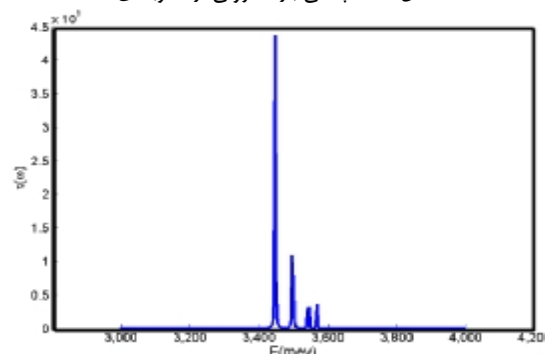
بار منفی این الکترون‌ها و بار مثبت آلاینده‌های یونیزه شده آنها را به سمت دیواره‌های چاه کشانده و باعث ظهور میدان الکتریکی در دو طرف ساختار چاه کوانتومی و در نهایت

نتیجه‌گیری

آنچه که در بررسی ساختارهای هسته-پوسته و هسته-چندپوسته از جنس لایه‌های AlGaIn/GaN که در راستای صفحه‌های m رشد یافته است، حائز اهمیت است. غیر قطبشی بودن این راستا و حذف اثرات ناشی از قطبش خودبه‌خودی و پیزوالکتریک مربوط به آن است. اثراتی که باعث ایجاد پدیده اشتراک می‌شدند و همپوشانی توابع موج الکترون و حفره را در دو باند ظرفیت و رسانش به هم می‌زدند. در این مقاله سعی شد تا با معرفی ساختارهای متفاوت نانوسیم‌های هیبریدی دیسک کوانتومی تاثیر قطبش در تابش لومینسانس بررسی گردد، همچنین تاثیر افزایش تعداد دیسک‌ها در افزایش پیک‌های تابش لومینسانس بررسی شد.



شکل ۱۱. چگالی بار لکترونی آزاد دوبعدی



شکل ۱۲. لومینسانس مربوط به ساختار هسته-چند پوسته

References

- [1] S.L. Chung, Physics of Photonic Devices WILEY. Inc.. Hoboken. New Jersey, 2009, ISBN 978-0-470-29319-5
- [10] D. O. Olawale, O. O. I. Okoli, R. S. Fontenot, W. A. Hollerman, Triboluminescence Theory, Synthesis, and Application, Springer, 2016, ISBN 9783319388410.
- [11] A. J.Bard, Electrogenerated Chemiluminescence, American Chemical Society, 2005, ISBN 0-8247-5347-X
- [12] A. J. Bard, L. R. Faulkner, Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications, 2nd Edition, Wiley, 2001, ISBN 9780471043720.
- [13] A. Bertoni, M. Royo, F. Mahawish, G. Goldoni, Electron and hole gas in modulation-doped GaAs/AlGaAs radial heterojunctions, Phys. Rev. B. 84 (2011) 205323. doi:10.1103/PhysRevB-84.205323.
- [14] B. Valer, Molecular Fluorescence Principles and Applications, 2nd Edition, (2012) 32, ISBN: 978-3-527-32837-6.
- [15] J. Jadcak, 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. doi:10.1021/nl500818k.
- [16] N. K. Shinde, S. J. Dhole, H.C. Swart, K. Park, Basic Mechanisms of Photoluminescence, Phosphate Phosphors for Solid-State Lighting (2012), 41-59, ISBN: 978-3-642-34312-4
- [17] A. Alkauskas, J. L. Lyons, D. Steiauf, C. Van, First-Principles Calculations of Luminescence Spectrum Line Shapes for Defects in semiconductor: The Example of GaN and ZnO, Phys. Rev. Lett. 109, 267401 (2012), doi: 10.1103/PhysRevLett.109.267401
- [18] P. Harrison, Quantum Wells, Wires and Dots, WILEY 2nd ed., UK, 2005, ISBN 978-0-470-01079-2.
- [19] M. Bryan, L. Francois, Q. Li, G.T. Wang, Nanoscale Effects on Heterojunction Electron Gases in GaN / AlGaIn, Nano Lett. (2011) 3074–3079. doi:10.1021/nl200981x.
- [2] Namvari, E., Shojaei, S., Asgari, A. The Study of Electronic Structure and Luminescence Spectrum of Core-Multi Shell Semiconductor Nano Wire. Quarterly Journal of Optoelectronic, 2017; 1(4): 53-58.
- [20] M. Behpour, M. Golestaneh, E. Honarmand, Luminescence spectroscopy, Jangal, Javedaneh, 1387, ISBN 9789642573783.
- [21] M. Kalafi, A. , Asgari, The behavior of two-dimensional electron gas in GaN/AlGaIn/GaN heterostructures with very thin AlGaIn barriers, Phys. E. 19 (2003) 321–327. doi:10.1016/S1386-9477(03)00377-1.
- [22] M. Royo, A. Bertoni, G. Goldoni, Landau levels, edge states, and magnetoconductance in GaAs/AlGaAs core-shell nanowires, Phys. Rev. B. 87 (2013) 115316. doi:10.1103/PhysRevB.87.115316.
- [23] E. Namvari, S. Shojaei, A. Asgari, Luminescence Emission from Al_{0.3}Ga_{0.7}N/GaN Multi Quantum Disc core/shell Nanowire: Numerical approach, Phys. E Low-Dimensional Syst. Nanostructures. 93

منابع

- (2017) 132–142. doi:10.1016/j.physe.2017.06.002
- [24] E. Namvari, S. Shojaei, A. Asgari, Luminescence Emission from Nonpolar Al_{0.3}Ga_{0.7}N/GaN Core-shell and core-multi-shell Nanowires, *superlattice and microstructures*, 112(2017), 118-127
- [3] J. Ristic, C. Rivera, E. Calleja, A. Cario, Carrier-confinement effects in nanocolumnar GaNAl_xGa_{1-x}N quantum disks grown by molecular-beam epitaxy, *Physical Review B* 72(8), 2005, doi: 10.1103/PhysRevB.72.085330.
- [4] 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. doi:10.1088/0957-4484/18/38/385306.
- [5] G. Jacopin, F.H. Julien, F. Furtmayr, et al., Photoluminescence polarization properties of single GaN nanowires containing Al_xGa_{1-x}/GaN quantum discs, *Phys. Rev. B*. 81 (2010) 45411. doi:10.1103/PhysRevB.81.045411.
- [6] G. Jacopin, L. Rigutti, J. Teubert, F.H. Julien, F. Furtmayr, P. Komininou, et al., Optical properties of GaN-based nanowires containing a single Al_{0.14}Ga_{0.86}N/GaN quantum disc, *Nanotechnology*. 24 (2013) 125201. doi:10.1088/0957-4484/24/12/125201.
- [7] U. Mishra, J. Singh, Semiconductor device physics and design, 2007. doi:10.1007/978-1-4020-6481-4.
- [8] H. Morkoc, Handbook of Nitride Semiconductors and Devices, Volume 1, Materials Properties, *Physics and Growth*, 2009, ISBN: 978-3-527-62846-9.
- [9] P.K. Basu, Theory of optical processes in Semiconductors, Oxford Science Publication, United Sttate, 1997, ISBN 0-19-851788-2.
- [25] M. Mata, X. Zhou, F.Furtmayr, A review of MBE grown 0D, 1D and 2D quantum structures in a nanowire, *Journal of Materials Chemistry C*, 2013(1), 4300-4312, doi: 10.1039/c3tc30556b.