Quarterly Journal of Optoelectronic
Year 1, No. 4, Spring 2017 (P 53-58)

فصلنامه
اپتوالکترونیک
سال اول، شماره چهارم، بهار 1396 (ص 53 - 58)

مطالعهٔ ساختار الکترونی و طیف لومینیسانس نانوسیم نیم رسانای هسته-چند پوسته

الهه ناموری[*1]، سعید شجاعی[2]، اصغر عسگری[3و4]
1. دانشجوی دکتری، پردیس بین المللی ارس، دانشگاه تبریز، ایران
2. دانشیار، گروه فتونیک الکترونیک، پژوهشکده فیزیک و ستاره‌شناسی، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران
3. استاد، گروه فتونیک 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[*1], S. Shojaei[2], A. Asgari[3,4]
1. PhD Student, Aras International Campus - University of Tabriz, Tabriz, Iran
2. Asociate 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 چینش 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 آلایش مناسب در سیستم و تاثیرات 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 نیتریدی غیر قطبشی هسته - پوسته، چگالی بار آزاد، حل خودسازگار شرودینگر-پواسون.

*Corresponding Author: elahenamvari@gmail.com
* **نویسندهٔ مسئول**:

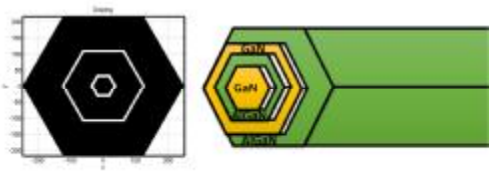
مقدمه

استفاده از نانوسیم‌های نیم رسانا (NWs) [9-14] در کاربردهای اپتوالکترونیکی مانند سنسورها [1و2] 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 نیتریدی و مطالعهٔ انواع لومینسانس به ویژه در صفحات نیتریدی 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 [20و21] با آرایش‌های گوناگون و ساختارهای هسته- پوسته و هسته- چند پوسته [22و23]، محاسبات عددی کامل و جامعی برای مطالعهٔ لومینسانس ناشی از تغییر ساختار و چینش این نانو سیم‌ها گزارش نشده است. محاسبات ساختار الکترونی، اثر افزایش آلایش بر روی این ساختار و کج‌شدگی آنها، محل دقیق تراز فرمی، مطالعهٔ چگالی احتمال وجود ذرات و محاسبهٔ دقیق گذارهای ممکن در لومینسانس از جملهٔ مسائل مهمی است که در این مقاله مورد مطالعه دقیق قرار گرفته است.

مدل‌بندی

در شکل (1) یک نمونه از نانوسیم نیم رسانای هسته- چند پوسته 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 آلاییدگی از نوع n در اطراف محور و در بین لایه‌های مختلف در نظر گرفته شده است. این مکان آلاییدگی 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 [21] متمایز می‌کند.



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

برای محاسبهٔ لومینسانس ناشی از این چینش از رابطهٔ (1) استفاده می‌شود:

$$\tau(\omega) \propto \sum_{nm}|S_{nm}|^2 \int \frac{dk_{...}}{2\pi}\mathcal{F}^e(\epsilon^e_{nk},T)\left(1-\mathcal{F}^h(\epsilon^h_{mk_{...}}-\mu,T)\right) \times \Gamma(\epsilon^e_{nk}-\epsilon^h_{mk}-\hbar\omega-\gamma) \quad (1)$$

که در آن $S_{nm} = \int d\vec{r}\psi^e_n(\vec{\rho})\,\psi^h_m(\vec{\rho})$ است. S_{nm} معرف تابع هم‌پوشانی بین تراز nام باند رسانش و تراز mام باند ظرفیت، $\mathcal{F}^{e(h)}$ تابع پرشدگی فرمی الکترون (حفره) در دمای اتاق، Γ تابع پهن‌شدگی لورنتس است که میزان پهن‌شدگی پدیدهٔ شناختی آن، γ، معادل 1mev قرار گرفته است [21].

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

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

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 صرفنظر شده است، ساختار مدل را تعریف می‌کنند.

با چشم‌پوشی از اثر تجمعی بارها در گوشه‌ها می‌توان از معادلهٔ 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 رابطهٔ زیر محاسبه کرد.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\frac{\rho}{m^{\parallel *}_{e(h)}(\vec{\rho})}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+ V_{ks}(\vec{\rho})\right]\psi^{e(h)}_{n(m)}(\vec{\rho}) = \epsilon_{r^{e(h)}_{n(m)}}\psi^{e(h)}_{n(m)}(\vec{\rho}) \quad (3)$$

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

مقادیر محاسبه شده از رابطهٔ (3) برای به دست آوردن چگالی بار کل، مطابق روابط (4-6) زیر استفاده می‌شود. با جای‌گذاری معادله (6) در معادلهٔ پواسون (7) می‌توان پتانسیل هارتری را که معرف میزان کج‌شدگی ساختار باند است، محاسبه کرد.

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

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

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

$$\nabla_{\vec{\rho}}\left[\varepsilon_{(\vec{\rho})}\nabla_{\vec{\rho}}V_H(\vec{\rho})\right] = -\rho_{tot}(\vec{\rho})/\varepsilon_0 \quad (7)$$

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

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 جفت نشدن ساختار شبکه هنگام در کنار هم قرار گرفتن ساختارهای نیتریدی است [22].

هر چند قطبش، یکی از مشخصه‌های مهم در مواد نیتریدی 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 نیتریدی، یعنی قطبش آن از معادلات حذف شود. دلیل آن را باید در مطالعهٔ 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 معادلهٔ پواسون (7)، پتانسیل هارتری است که نقش مهمی در میزان کج شدگی ساختار باند و تاثیر آن را در جابه‌جایی ترازهای انرژی و ایجاد تغییر در چگالی احتمال وجود حاملان دارد. شرط اتمام حلقهٔ خودسازگار شرودینگر- 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.

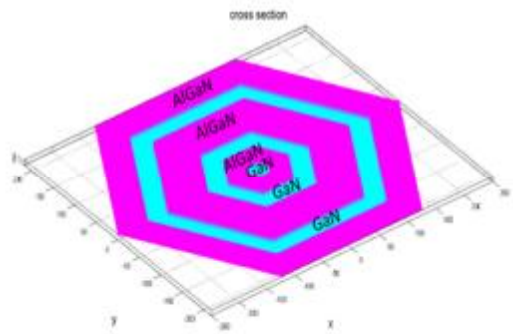
محاسبات و نتایج

در این مقاله نمونهٔ 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/AlGaN با اطلاعات فیزیکی مشخص طبق جدول (1) هستند.

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

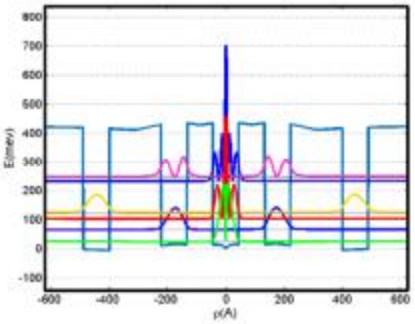
جدول 1. Physical Parameters of AlxGa(1-x)N at 300 K

Property		unit	Ref.
$Al_{0.3}Ga_{0.7}N$			
Static dielectric constant	10.31	ε_0	[28]
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	[28]
Static dielectric constant	10.4	ε_0	
electron effective mass at 300K $m_e^{\perp} = m_e^{\parallel}$	0.20	m_0	[29]
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	



شکل 2. مدل نانو سیم هسته-چند پوسته

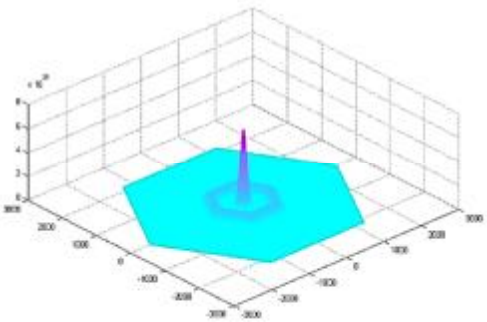
محاسبات خودسازگاری شرودینگر- پواسون برای کل ساختار به صورت منسجم در تکرارهای متوالی طبق یک الگوریتم منظم [21]، تا دست‌یابی به شرط هم‌گرایی ادامه پیدا می‌کند. پاسخ معادلات بعد از هم‌گرایی را می‌توان در کج شدگی ساختار باند، ترازهای انرژی و توابع موج مطابق شکل (3) مشاهده کرد. هر چند شکل (3) وجود پنج چاه کوانتمی 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 وسیلهٔ 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 عمدهٔ بارهای آزاد در تراز انرژی پایه و مطابق با تابع موج اول توزیع خواهند شد و در ترازهای بعدی چگالی کمتری از بار آزاد متمرکز خواهد بود.



شکل3: ساختار باند، ترازهای انرژی و توابع موج

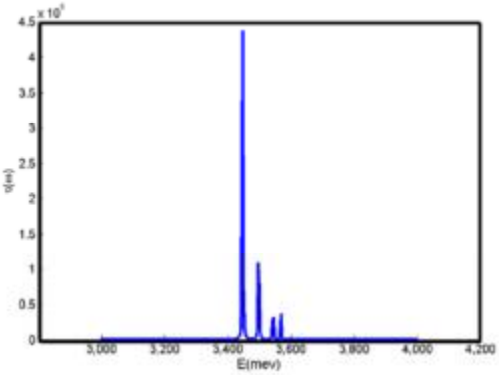
همان طور که در شکل (3) نشان داده شده است، شش تراز مجاز برای قرار گرفتن الکترون‌ها در باند رسانش وجود دارد. محاسبات مربوط به چگالی احتمال وجود حاملان (الکترون‌ها) در این شش تراز انرژی میزان شدت لومینسانس و تغییرات ساختار باندی را نشان می‌دهند.

در شکل (4) چگالی بار آزاد الکترونی دوبعدی (2DEG) در باند رسانش نشان داده شده است. این بارها که نتیجه یونیزه شدن دوپنده‌ها 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 دوپنده‌های یونیزه شده آنها را به سمت دیواره‌های چاه می‌کشاند و باعث ظهور میدان الکتریکی در دو طرف ساختار چاه کوانتمی و در نهایت کج شدن لبه آن می‌شود.



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

از تناظر بین شکل (3) و شکل (4) می‌توان ارتباط بین توابع موج و احتمال حضور بارهای آزاد در لایهٔ 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. درواقع 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

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 32، 77، 110، 122، 240و 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 آلایش مشاهده شد که علی‌رغم تغییر در میزان کج‌شدگی‌های لبهٔ 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 آلاییش 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 آلایش 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 فاصلهٔ ترازها در هر مورد نسبت می‌دهیم.

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 Silcon 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. ofThe 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 Ga N ⁄ (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 Al0.3 Ga0.7 N/GaN Multi Quantum Disc core/shell Nanowire: Numerical approach, Phys. E Low-Dimensional Syst. Nanostructures. 93 (2017) 132–142.

[22] J. Jadczak, 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/AlGaN Core/Shell Nanowires, Nano Lett. 11 (2011) 3074–3079.