





ضریب جذب نوری در چاههای کوانتومی کرنشی دوگانه ZnO/MgZnO

مهناز مجاب آبپرده، محمد جواد کریمی، سید مهدی حسینی

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شیراز، شیراز

چکیده - در این مقاله، ضریب جذب نوری کل در چاههای کوانتومی کرنشی دوگانه ZnO/MgZnO مطالعه می شود. اثرات پهنای سد و غلظت منیزیم بر روی ضریب جذب نوری کل مورد بررسی قرار می گیرند. نتایج نشان می دهند که با افزایش پهنای سد قله تشدید ضریب جذب نوری کل افزایش می یابد و به سمت مقادیر انرژی فوتون فرودی کمتر جابجا می شود. همچنین، با افزایش غلظت منیزیم اندازه قلههای تشدید ضریب جذب نوری کل کاهش می یابد و مکان آنها به سمت انرژی های فوتونی بیشتر می رود.

Optical Absorption Coefficient of Strained ZnO/MgZnO Double Quantum Wells

Mahnaz Mojab Abpardeh, Mohammad Javad Karimi, Seyyed Mehdi Hosseini

College of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz

Abstract- In this paper, the total optical absorption coefficient in strained ZnO/MgZnO double quantum wells is studied. The effects of Mg concentration and barrier width on the total optical absorption coefficient are investigated. Results show that with increasing barrier width, the resonant peak of the total optical absorption coefficient increases and shifts to the lower values of the incident photon energy. Moreover, with increasing Mg concentration, the peaks of the total optical absorption decrease and their places shift to the higher values of photon energy.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت <u>WWW.Opsi.ir</u>قابل دسترسی باشد

۱- مقدمه

چاههای کوانتومی که از نیمرساناهای دارای ساختار شش گوشهای ساخته شدهاند، از جهت کاربردهای ابزاری از قبیل LEDهای فرابنفش، آبی و سبز، دایود لیزرها، آشکارسازهای نوری و کلیدزنهای تمام نوری توجهات بسیاری را جلب کردهاند [۱]. در این میان میتوان به ترکیباتZnO, CdS, CdSe, GaN,... اشاره کرد که ZnO بدلیل مزایایی مانند دمای رشد پایین، غیرسمی بودن، مقاومت بالا نسبت به شدت تابش، هزينه كمتر و تكنولوژى سادەتر جهت رشد بيشتر مورد توجه قرار گرفته است [۲و۳]. ZnO از لحاظ خواص ساختاری، الکتریکی، اپتیکی و پیزوالکتریکی دارای سه ساختار شش گوشه ای، سنگ نمکی(NaCl) و سولفیدروی(Zincblende) با انرژی گاف نواری مستقیم ۳/۳۷ ev، انرژی اکسیتون Mev و انرژی فعالسازی دمایی ۲۵ Mev در دمای اتاق است که از میان این سه ساختار، تنها ساختار شش گوشهای در دمای اتاق پایدار است. ZnO بدلیل گاف نواری عریض در محدوده مرئی یک ماده شفاف محسوب می شود و به عنوان اكسيد رساناى شفاف (TCO) طبقهبندى مى شود. همچنین، ZnO جز مواد پیزوالکتریک قرار می گیرد که خواص پیزوالکتریک غیرهمسان آن بدلیل ساختار بلوری آن میباشد که دارای عدم تقارن مرکزی است. بنا به خواص منحصر بفرد ذکر شده، از ZnO می توان در ساخت ابزارهای اپتوالکترونیکی فرابنفش مانند آشکارسازهای فرابنفش، LEDها و دایود لیزرها، ابزارهای اپتیکی طول موج کوتاه، ابزارهای فتونیکی که در ناحیه فرابنفش و نور مرئی کار میکنند، سلولهای خورشیدی، حسگرهای گازی، نانولیزرهای فرابنفش، آشکارسازهای نوری و ابزارهای پیزوالکتریک استفاده کرد [۴]. بواسطه عناصری مانند Mg, Cd, Be ترکیبات سه تایی و بنابراین، نانوساختارهای کوانتومی مبتنی بر ZnO خواهیم داشت. یکی از خصوصیات اساسی این نانوساختارها وجود میدان الكتريكي داخلي قوى از مرتبه MV/cm حاصل از قطبش-های خودبخودی و پیزوالکتریک است. از دهه گذشته کار بر روی نانوساختارهای کوانتومی مبتنی بر ZnO شروع شده است و اخیرا محققان بسیاری بصورت تجربی و تئوری به بررسی پدیدههای مختلف پرداختهاند: تیسیر و همکارانش اثر فشار هیدروستاتیک بر روی میدان

الکتریکی داخلی در چاه کوانتومی ZnO/ZnMgO را بررسی کردند و دریافتند که با افزایش فشار میدان نیز افزایش مییابد [۵]. ژاوو و همکارانش جذب زیرباندی فروسرخ میانی در دمای اتاق را مشاهده کردند [۶]. چیاریا و همکارانش به مطالعه عددی LEDهای مبتنی بر ZnO پرداختند [۷].

بدلیل اهمیت خواص نوری ترکیبات ZnO و کاربردهای ذکر شده آنها در ساخت ادوات اپتوالکترونیکی، ما در این مقاله به بررسی اثر غلظت منیزیم و پهنای سد بر روی ضریب جذب نوری چاه کوانتومی کرنشی دوگانه ZnO/ZnMgO میپردازیم.

۲- مبانی نظری

یک چاه کوانتومی نشان داده شده در شکل ۱ با ساختار $Mg_{0.34}Zn_{0.66}O/ZnO/Mg_{x}Zn_{1-x}O/ZnO/Mg_{0.34}Zn_{0.66}O$ در نظر می گیریم. لایه ها در جهت محور z بر روی زیرلایه ضخیم $Mg_{0.34}Zn_{0.66}O$ رشد می کنند. در هرلایه از ساختار (چاهها وسدها) میدان الکتریکی داخلی از رابطه زیر حاصل می شود [۸]:

$$F_{j} = \frac{\sum_{k} (P_{k} - P_{j}) (L_{k} / \varepsilon_{k})}{\varepsilon_{j} \sum_{k} (L_{k} / \varepsilon_{k})}$$
(1)

در رابطه (۱)، ٤، L و P بترتیب بیانگر ثابت دی الکتریک، طول سد یا چاه و قطبش کل است. جزئیات محاسبه قطبش کل در مراجع [۹و۱۰] آمده است.



شکل۱ : نمایه ای از پتانسیل تحدید بر حسب مکان

با در نظر گرفتن تقریب جرم موثر، معادله شرودینگر مستقل از زمان در یک بعد طبق رابطه زیر نوشته می شود:

$$-\frac{\hbar^{2}}{2}\frac{d}{dz}\left[\frac{1}{m^{*}(z)}\frac{d\psi(z)}{dz}\right]+V(z)\psi(z)=E\psi(z) \quad (\Upsilon)$$
For a set of the set

$$\begin{split} m^*, V(z) = \begin{cases} m^*_s, V_0 & j=1 \\ m^*_w, eF_{w_1}z & j=2 \\ m^*_b, eF_{w_1}L_{w_1} + eF_{b_1}\left(z-L_{w_1}\right) + V_0 & j=3 \\ m^*_w, eF_{w_1}L_{w_1} + eF_{b_1}L_{b_1} + & j=4 \quad (\texttt{V}) \\ eF_{w_2}\left[z-(L_{w_1}+L_{b_1})\right] \\ m^*_s, eF_{w_1}L_{w_1} + eF_{b_1}L_{b_1} + eF_{w_2}L_{w_2} & j=5 \\ + eF_{b_2}\left[z-(L_{w_1}+L_{b_1}+L_{w_2})\right] + V_0^{"} \end{cases} \\ \vdots \\ \psi(z) = \begin{cases} C_1 \exp(k_1 z) + D_1 \exp(-k_1 z) & j=1 \\ C_j Ai(k_j(z)) + D_j Bi(k_j(z)) & j=2,3,4,5 \end{cases} \quad (\texttt{f}) \\ \text{y} \\ \text{y} \end{cases} \end{split}$$

$$k_{1} = \left(\frac{2m_{s}^{*}(V_{0} - E)}{\hbar^{2}}\right)^{1/2}$$
 (δ)

$$k_{j}(z) = \left(\frac{\hbar^{2}e^{2}F_{j}^{2}}{m_{j}^{*}}\right)^{-1/3} \left[V_{j}(z) - E\right]$$
 (%)

با استفاده از روش ماتریس انتقال و اعمال شرایط مرزی ضرایب توابع موج به وسیله ۸ ماتریس به یکدیگر مرتبط میشوند [۸۹[۲]. با انجام پارهای محاسبات [۱۲]، رابطه میشوند (۸۹[۲]. با انجام پارهای محاسبات [۱۲]، رابطه رزیر حاصل میشود: $\begin{bmatrix} C_1 \\ D_1 \end{bmatrix} = M_1^{-1}M_2M_3^{-1}M_4M_5^{-1}M_6M_7^{-1}M_8 \begin{bmatrix} C_5 \\ D_5 \end{bmatrix} = M^T \begin{bmatrix} C_5 \\ D_5 \end{bmatrix}$ (۷) که MT یک ماتریس 2×2 می باشد.

با توجه به این نکته که توابع موج در بینهایت به سمت صفر میل می کنند، ضرایب $D_1 ext{ }_0 D_1 ext{ }_1$ باید صفر باشند. بنابراین، طبق روابط (۹) و (۱۰)، رابطه زیر بدست میآید: $\begin{cases} C_1 = M_{11}^T \times C_5 \\ 0 & = M_{21}^T \times C_5 \end{cases}$

 M^{T} طبق رابطه(۹) و با توجه به اینکه مولفه های ماتریس M^{T} تابعی از ویژه مقادیر انرژی هستند، با حل معادله تابعی از ویژه مقادیر انرژی و سپس مولفه های ماتریس های $M_{21}^{T}(E)=0$ ماتریس های M بدست خواهند آمد. در نهایت، مقادیر ضرایب توابع موج حاصل خواهند شد. پس از بدست آمدن توابع موج نهایی و محاسبه ویژه مقادیر انرژی متناظر، ضرایب جذب نوری با بهره گیری از روش ماتریس چگالی [۹] بدست میآیند. ضرایب جذب نوری خطی (مرتبه سوم) بصورت نوری خطی (مرتبه سوم) بصورت زیر میباشند:

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_{R}}} \frac{\left|M_{21}\right|^{2} \sigma_{v} \hbar \Gamma_{12}}{\left(E_{21} - \hbar \omega\right)^{2} + \left(\hbar \Gamma_{12}\right)^{2}}$$
(1.)

$$\begin{split} \alpha^{(3)}(\omega,I) = &-\omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \Big(\frac{I}{2\epsilon_0 n_r c} \Big) \frac{\left|M_{21}\right|^2 \sigma_v \hbar \Gamma_{12}}{\left[\left(E_{21} - \hbar \omega\right)^2 + \left(\hbar \Gamma_{12}\right)^2 \right]^2} \times \\ & \left[4 \left|M_{21}\right|^2 - \frac{\left|M_{22} - M_{11}\right|^2 \left[3E_{21}^2 - 4E_{21}\hbar\omega + \hbar^2 \left(\omega^2 - \Gamma_{12}^2\right) \right] }{E_{21}^2 + \left(\hbar \Gamma_{12}\right)^2} \right] \end{split} \tag{11}$$

$$\mathbf{E}_{21} = \frac{\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1}{\hbar} \tag{177}$$

$$M_{ii} = e \int \psi_i^*(z) z \psi_i(z) dz \tag{14}$$

۲-1- بحث، جدول و نمودارها

پارامترهای ماده در جدول (۱) آمده است و سایر پارامترها $\sigma_v = 3 \times 10^{22} \text{ m}^{-1}$ ،I=0.2 $\mu w/cm^2$ نیز عبارتند از: $\mu = 4\pi \times 10^{-7} \text{ Hm}^{-1}$ و $T_{12} = 0.24 \text{ ps}$

جدول۱: پارامترهای ماده مورد استفاده در محاسبات [۷]

Parameter	$Mg_{x}Zn_{1-x}O(0{\le}x{\le}0.4)$
$a(A^0)$	3.25+0.05x
$E_g(eV)$	$3.373 + 1.046x + 0.87x^2$
$\mathrm{m}^{\square}_{\mathrm{e}}$	0.23+0.05x
c ₁₃ (GPa)	104
c ₃₃ (GPa)	216
ω	8.1+1.5x
$e_{13}(cm^{-2})$	-0.53+0.15x
$e_{33}(cm^{-2})$	1.19+1.07x
$p^{sp}(cm^{-2})$	-0.057-0.064x



شکل۲ : ضریب جذب نوری کل بر حسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف پهنای سد.

تغییرات ضریب جذب نوری کل بر حسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف پهنای سد در شکل ۲ رسم شده است. با افزایش پهنای سد اندازه میدانهای پیزوالکتریک $F_{\rm w}$ و $F_{\rm d}$ کاهش مییابند، که این منجر به کاهش پتانسیل تحدید نیز میشود. بنابراین، اختلاف انرژی ترازها (E_{21}) کاهش مییابد و عنصر گشتاور دوقطبی الکتریکی (M_{21}) کاهش مییابد. مکان قلهها به انرژی ترازه آنها به $2_{11}|M_{21}|$ بستگی دارد که در اینجا تغییرات M_{21} غالب میباشد. بنابراین، اندازه قلهها افزایش یافته و به سمت انرژی فوتونی کمتر جابجا می-شوند.



شکل۳: ضریب جذب نوری کل بر حسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف غلظت منیزیم.

در شکل۳ ضریب جذب نوری کل بر حسب انرژی فوتون فرودی برای سه مقدار مختلف غلظت منیزیم رسم شده است. با افزایش غلظت منیزیم قطبشهای خوبخودی و پیزوالکتریک و در نتیجه قطبش کل افزایش مییابد و طبق رابطه(۱) میدان الکتریکی داخلی افزایش مییابد که در نتیجه پتانسیل تحدید کوانتومی افزایش مییابد که

این منجر به افزایش E₂₁ و کاهش M₂₁ میشود. بنابراین، با افزایش غلظت منیزیم اندازه قله ضریب جذب نوری کل نیز مشابه M₂₁ کاهش می یابد و قلهها به سمت انرژیهای فوتونی بیشتر میروند.

۳- نتیجهگیری

ما در این مقاله، با استفاده از روش ماتریس انتقال ساختار الکترونیکی چاه کرنشی کوانتومی دوگانه ZnO/MgZnO را بدست آوردیم. سپس با استفاده از روش ماتریس چگالی ضرایب جذب نوری این سیستم را محاسبه کردیم. نتایج نشان میدهند که با افزایش ضخامت لایه سد قله ضریب جذب نوری به سمت انرژیهای کمتر جابجا می-شود و اندازه آن افزایش مییابد. در حالیکه، با افزایش غلظت منیزیم قلهها به سمت انرژیهای بیشتر جابجا می-شوند و اندازه آنها کاهش مییابد.

مراجع

[1] J. Zhu, S. L. Ban, S. H. Ha, "A simulation of intersubband absorption in $ZnO/Mg_{x}Zn_{l-x}O$ quantum wells with an external electric field", Superlatt. Microstruct, Vol. 56, pp. 92-98, 2013.

[2] J. Davis, C. Jagadish, "ZnO/MgZnO quantum wells", *In GaN and ZnO-based Materials and Devices*, Springer Berlin Heidelberg, pp. 413-434, 2012.

[3] J. C. Fan, S. L. Chang, Z. Xie, J. M. Ballato, "ZnO-based light-emitting diodes"; *INTECH Open Access Publisher*, 2013.

[4] K. Nomura, H. Ohta, K. Ueda, T. Kamiya, M. Hirano, H. Hosono, "Thin-Film Transistor Fabricated in Single-Crystalline Transparent Oxide Semiconductor", Science, Vol. 300, pp. 1269-1272, 2003.

[5] H. Teisseyre, A. Kaminska, S. Birner, T. D. Young, A. Suchocki, A. Kozanecki, "Influence of hydrostatic pressure on the built-in electric field in ZnO/ZnMgO quantum wells", J. Appl. Phys. Vol. 119, pp. 1-8, 2016.

[6] K. Zhao, G. Chen, B. S. Li, A. Shen, "Mid-infrared intersubband absorptions in ZnO/ZnMgO multiple quantum wells", Appl. Phys. Lett, Vol. 104, pp. 1-4, 2014.

[7] S. Chiaria, M. Goano, E. Bellotti, "Numerical study of ZnObased LEDs", IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 47, No. 5, pp. 661-671, 2011.

[8] P. Harrison, "*Quantum Wells, Wires and Dots*", 2nd ed, Wiley, New York, 2006.

[9] M. J. Karimi, H. Vafaei; "Intense laser field effects on the linear and nonlinear intersubband optical properties in a strained InGaN/GaN quantum well", Physica B, Vol. 452, pp. 131–135, 2014.

[10] M. J. Karimi, H. Vafaei, "Second-order nonlinear optical properties in a strained InGaN/AlGaN quantum well under the intense laser field", Superlatt. Microstruct, Vol. 78, pp. 1–11, 2015.

[11] H. Wang, H. Xu, Y. Zhang, "Indispensable factors influence the quasi-bound levels of biased multi-barrier quantum well structures", Phys. Lett. A , Vol. 340, pp. 347–354, 2005.

[12] S. Usefzadeh, M. J. Karimi, "Electromagnetically induced transparency in the strained quantum wells: Effects of structural parameters and geometrical size", Optik-International Journal for Light and Electron Optics, Vol. 127, No. 21, pp. 10208-10215, 2016.