بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۸ تا ۱۰ بهمن ماه۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز

# تاثیر درصد استوکیومتری بر ترازهای انرژی نقطه کوانتومی هرمی شکل $In_xGa_{1-x}As$ مبتنی بر GaAs

مهدی احمدی برجی، اسفندیار رجایی و کاوه کیهانی
دانشکده فیزیک، دانشگاه گیلان، رشت

**چکیده- در این مقاله، لبه نوار و ترازهای انرژی نقاط کوانتومی هرمی شکل $In_xGa_{1-x}As$ روی زیرلایه GaAs بررسی نموده‌ایم. نشان مـی-دهیم که با تغییرات درصد استوکیومتری In نسبت به Ga در نقطه کوانتومی مقادیر مجاز انرژی در نقاط افزایش یافته و لبه نوارهای هدایت و رسانش به هم نزدیک‌تر می‌شوند و همچنین طول موج گسیلی نور از ترازها افزایش می‌یابد. نتایج ما بسیار بـا نتـایج تجربـی و تئـوری‌هـای پیشین سازگار هستند.**

کلیدواژه- کرنش، لبه نوار، نانوالکترونیک، نقاط کوانتومی

# Effect of indium percentage on energy levels of pyramidal $In_xGa_{1-x}As$ quantum dots on GaAs substrate

Mahdi Ahmadi Borji, Esfandiar Rajaei and Kaveh Kayhani

University of Guilan, Namjoo street, Rasht, Iran

Abstract- In this paper, we have studied the bandedge and energy levels of pyramidal InGaAs based quantum dots (QDs) surrounded by GaAs. We show that by changing the In ratio rather than Ga in the QD, not only the allowed energy states increase, but also the conduction and valence bandedges get closer to each other. We even show that the radiation wavelength get longer. Our results appear to coincide with former researches.

Keywords: Strain, bandedge, nano-electronics, quantum dots



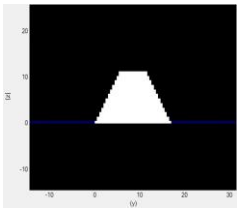
[ Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-06 ]

## ۱- مقدمه

ادوات نوری نانوساختار نیمرسانا به علت مزایای بسیاری که نسبت به ادوات نوری پیشین دارند بسیار مورد توجه هستند. روشهای تجربی مختلفی برای ساخت ناحیه فعال این ادوات به کار می‌روند که در این میان روش خودسامانی یک روش بهینه در ساخت نقاط کوانتومی به شمار می‌آید. مدل‌های تئوری به کار رفته برای مدل کردن این روش نشان می‌دهند که می‌توان نقاط به وجود آمده را که اندازه و شکل تصادفی دارند به شکل‌های هرمی، عدسی‌گونه، استوانه‌ای و ... مورد مطالعه قرار داد [1]. به ویژه لیزرهای نقطه کوانتومی InGaAs/GaAs در صنعت امروز کاربرد فراوان دارند. طول موج ساطع شده از نقاط کوانتومی به اختلاف ویژه مقادیر مجاز انرژی برای الکترون‌ها و حفره‌ها بستگی دارد. بنابراین برای مطالعه بیشتر لیزردهی این ادوات به بررسی ترازهای انرژی آنها پرداخته‌ایم. در صورتی که بتوان راهی برای کوچکتر کردن نقاط و در نتیجه دست یافتن به چگالی بالاتری از آنها پیدا کرد، کارایی لیزر نقطه کوانتومی بیشتر می‌شود. لذا سعی کرده‌ایم تا حالت‌های مجاز الکترونی در نقاط را با درصدهای استوکیومتری مختلف بررسی نموده و در نهایت یک اندازه درصد استوکیومتری بهینه پیشنهاد دهیم. در این تحقیق، نوارهای انرژی هدایت و ظرفیت نقطه کوانتومی هرمی شکل InGaAs بر مبنای GaAs را به همراه ویژه مقادیر انرژی آن به دست آورده‌ایم. این کار را با حل معادله شرودینگر و استفاده از Nextnano$^{++}$ [2] انجام داده‌ایم [3].

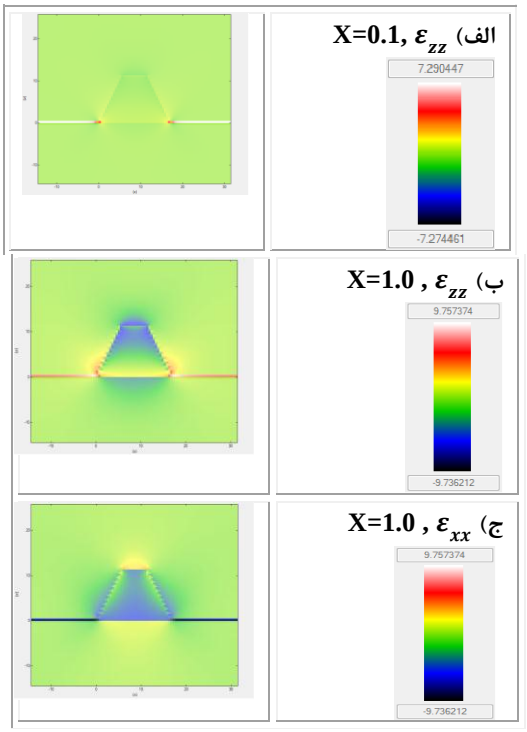
## ۲- نتایج و بحث و بررسی

شکل ۱ نمای جانبی ساختار نقطه کوانتومی هرمی شکل $InGaAs$ با قاعده مربعی به مساحت $17nm \times 17nm$ و ارتفاع $\frac{2}{3}$ برابر پهنای قاعده را در روی لایه $15nm - GaAs$ با لایه ترکننده به ضخامت $0.5nm$ نشان می‌دهد. این ساختار با شاخص (001) از زیرلایه GaAs رشد داده شده است.



شکل ۱. ساختار هرمی نقطه کوانتومی $InGaAs/GaAs$ همراه با لایه ترکننده

شکل ۲ الف و ب نمودارهای عنصر $\varepsilon_{zz}$ در تانسور کرنش را در صفحه $xy$ در دو مقدار آلایش $x$ نمونه نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود به علت عدم تطابق ثابت شبکه بین InGaAs و GaAs، نقطه کوانتومی دچار کرنش تراکمی می‌شود تا ثابت‌های شبکه در سطح مشترک بر هم منطبق شوند [۴] و لذا جابجایی مراکز بارهای مثبت و منفی باعث شکل‌گیری بارهای قطبشی می‌شود و بارهای قطبشی باعث القای میدان الکتریکی می‌شوند. این میدان باعث می‌شود تا ترازهای انرژی شیب گرفته و الکترون‌ها و حفره‌ها به دو سوی مخالف حرکت کنند.



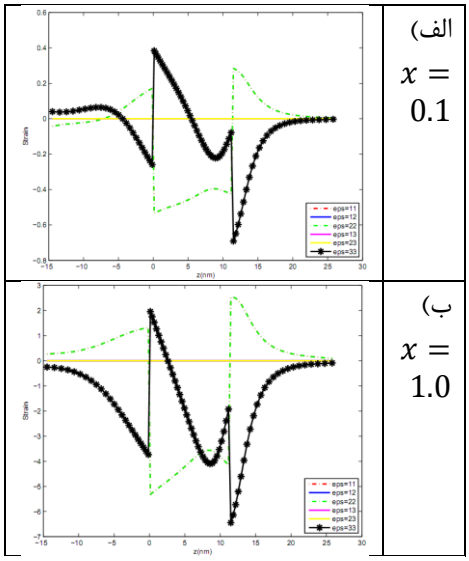

شکل ۲. نمودار کرنش در صفحه $xz$ برای مقادیر مختلف درصد استوکیومتری.

در آلایش کم عنصر $In$ کرنش در اکثر نقاط نمونه مقداری کوچک دارد و تنها در گرمها و روی لایه ترکننده قابل توجه است (شکل ۲-الف). با افزایش نسبت $In$ بر مقدار مطلق کرنش افزوده شده و همچنین کرنش‌های مثبت و منفی نیز به خوبی خود را نشان داده‌اند (شکل ۲-ب). همچنین کرنش $\varepsilon_{xx}$ را نیز در شکل ۲-ج نشان داده‌ایم. علاوه بر این، شکل ۳ عناصر مختلف تانسور $\varepsilon_{ij}$ را در آلایش‌های متفاوت در جهت رشد $z$ نمایش می‌دهد. در این شکل مقادیر $\varepsilon_{11}$ و $\varepsilon_{22}$ روی هم افتاده‌اند و $\varepsilon_{13}$، $\varepsilon_{23}$ نیز روی هم افتاده‌اند. مشاهده می‌شود که با افزایش آلایش $In$ مقدار کرنش افزایش یافته است. در شکل ۴ ساختار لبه نوارهای هدایت و ظرفیت را در صفحه $xz$ در دمای $300K$ و درصد استوکیومتری $In_{0.1}Ga_{0.9}As/GaAs$ را با درصد استوکیومتری $In_{1.0}Ga_{0.0}As/GaAs$ مقایسه کرده‌ایم. رنگ قرمز نشان‌دهنده مقدار انرژی بیشتر و رنگ بنفش نشان‌دهنده مقدار انرژی کمتر است. در شکل ۵-الف ساختار لبه نوارهای هدایت و ظرفیت را در جهت رشد و همچنین سه ویژه مقدار اولیه انرژی برای الکترون‌ها و اولین، دهمین و پانزدهمین ویژه مقادیر انرژی برای حفره‌ها در دمای $300K$ و درصد استوکیومتری $In_{0.1}Ga_{0.9}As/GaAs$ نشان داده‌ایم. همان‌گونه که از شکل پیداست، هیچ یک از ویژه مقادیر مجاز

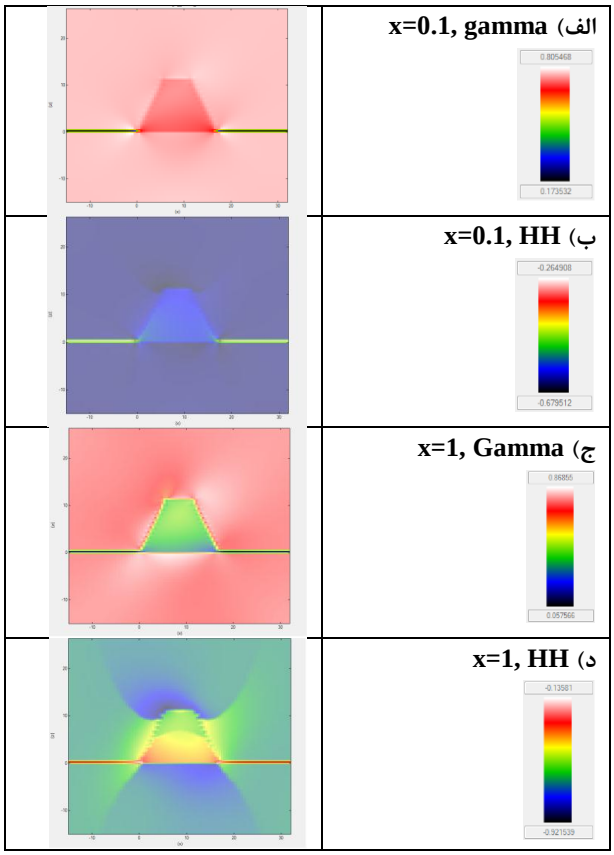


[ Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-06 ]

انرژی در داخل نقطه کوانتومی قرار نگرفته‌اند. در شکل۵-ب مقدار درصد آلایش ایندیم را به $x = 0.3$ افزایش داده‌ایم مشاهده می‌شود که یکی از ترازها در داخل نقطه می‌افتد. این تراز همان تراز حالت پایه GS است و در این حالت تراز برانگیخته (ES) خارج از نقطه است.

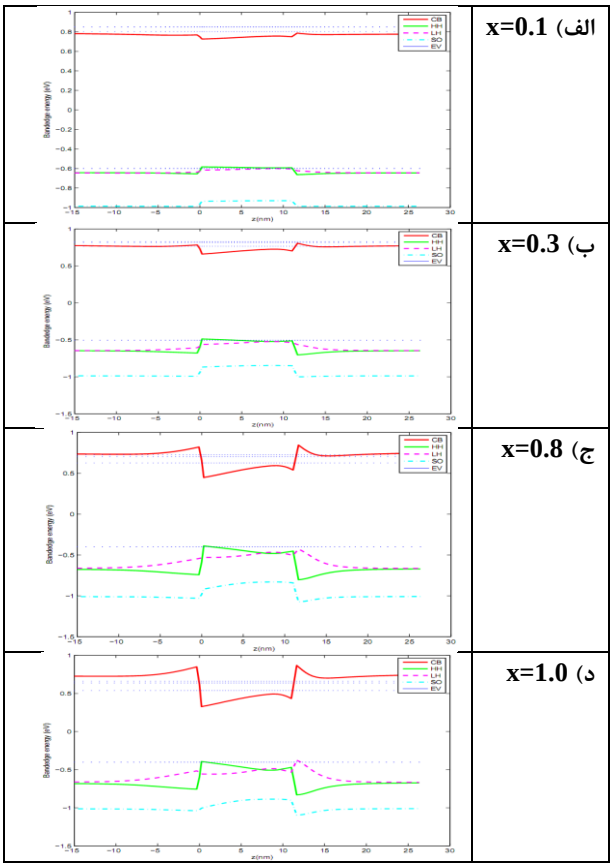



شکل ۳. عناصر ماتریسی تانسور کرنش بر حسب تغییرات $z$.




شکل ۴. ساختار لبه نوارهای هدایت و ظرفیت در صفحه xz متقاطع با مرکز نقطه کوانتومی در دمای $T = 300K$

با افزایش درصد ایندیم و به موازات آن کاهش مقدار گالیم می‌بینیم که تعداد ترازهای بیشتری در داخل QD قرار می‌گیرند که بنابراین در این حالت شامل تراز ES نیز خواهد بود. لذا در این حالت انتظار داریم که طول موج‌های بازترکیب مختلفی از QD دریافت کنیم. نه تنها افزایش تعداد حالت‌ها، جابجایی ترازهای انرژی نیز در این روند افزایش ایندیم قابل توجه و بسیار جالب است. به خوبی دیده می‌شود که کاهش مقدار گالیم در QD، موجب کاهش گاف نوار انرژی می‌شود. گذارهای مختلف در بازترکیب الکترون و حفره در شکل ۶ نمایش داده شده‌اند.

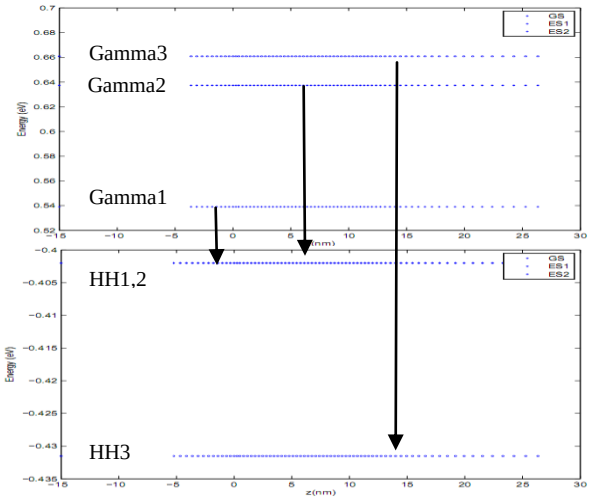



شکل ۵. ساختار لبه نوارهای انرژی هدایت و ظرفیت و ترازهای انرژی نوار هدایت و ظرفیت در دمای $300K$ .

در شکل ۷ همچنین اختلاف اولین ویژه‌مقادیر مجاز انرژی را برای الکترون و حفره برحسب تغییرات درصد $x$ نمایش داده‌ایم. این مقدار که نشان دهنده انرژی تابش شده از لیزر نقطه کوانتومی است با افزایش مقدار $x$ کاهش یافته و لذا طول موج فوتون‌های لیزر افزایش می‌یابد.

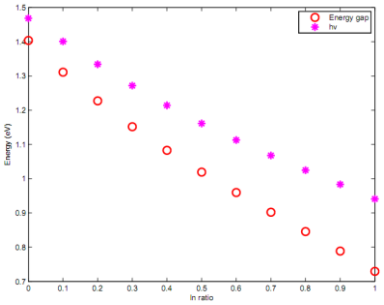


[ Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-06 ]




x=1

شکل ۶. بازترکیب‌های مختلف الکترون و حفره




شکل ۷. انرژی بازترکیب الکترون–حفره و گاف نوار بر حسب تغییرات x.

گاف انرژی که به صورت اختلاف لبه‌نوار هدایت و ظرفیت تعریف می‌شود با دایره‌های کوچک نشان داده شده است. از شکل مشخص است که با افزایش $x$ انرژی گاف کاهش یافته است. اما این که اختلاف انرژی گاف و انرژی فوتون تابشی دارای دو شیب مختلف هستند نشان از این دارد که هر چه درصد ایندیم بیشتر شود ترازهای مجاز انرژی فاصله بیشتری نسبت به لبه نوار می‌گیرند. خواهیم بود.

## مرجع‌ها


[1] Self-assembled quantum dots, Zhiming M. Wang, Springer, 2008

[2] http://www.nextnano.com/nextnanoplus

[3] Trellakis, A. et al. Te 3D nanometer device project nextnano: Concepts, methods, results. J. Comput. Electronics 5, 285 – 289 (2006).

[4] Birner, S. et al. nextnano: General purpose 3-D simulations. IEEE T. Electron Dev. 54, 2137 – 2142 (2007).

[5] S. Pereira, M.R. Correia, E. Pereira, C. Tiago-Cowan, Phys. Lett, Vol. 81, No. 7 (2002).

[5] IEEE JOURNAL OF QUANTUM ELECTRONICS, VOL. 42, NO. 3, MARCH (2006).

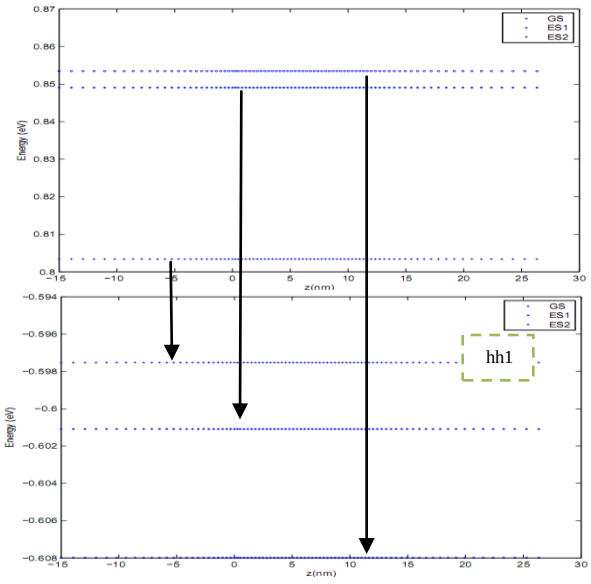
[4] Band-edge diagrams for strained III-V semiconductor quantum wells, wires, and dots, C. E. Pryor, M.-E. Pistol (2008)

[5] Numerical Simulation of Quantum Dots, Marta Markiewicz

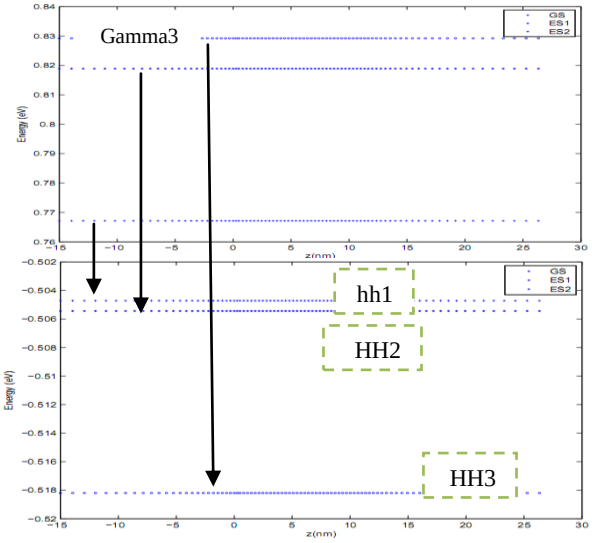
[6] Self-organization in strained heteroepitaxial nanostructures: multi-scale modeling, simulation and experiment, A. F. Bower, E. Chason, L. B. Freund and V. B. Shenoy

[7] Strain distribution and electronic spectra of InAs/GaAs self-assembled dots: An eight-band study, Phys. Rev. B, VOLUME 56, NUMBER 8 (1997).

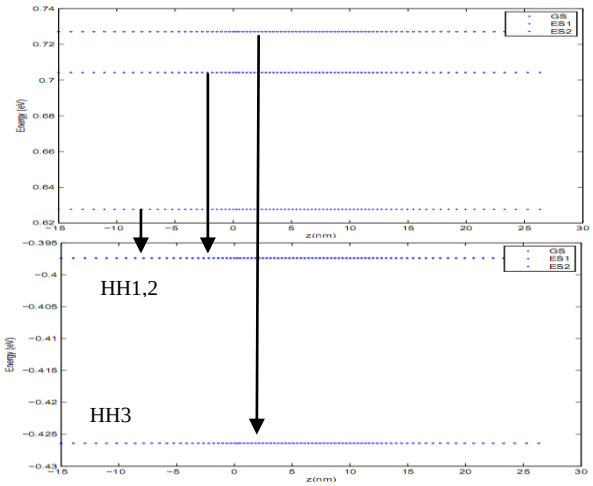
[10] Bernhard Grotz, Moritz V. Hauf, Markus Dankerl, Boris naydenov, Sébastien Pezzagna, Jan meijer, Fedor Jelezko, Jörg Wrachtrup, Martin Stutzmann, Friedemann Reinhard & Jose A. Garrido, "Charge state manipulation of qubits in diamond", Nature Communications, Vol. 10, 1038 (2012).


x=0.1




x=0.3




x=0.8



[ Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-06 ]