

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده فیزیک

گرایش حالت جامد

بررسی فرایندهای محدود کننده بازدهی قطعات نور گسیل

تشکیل شده از نانوساختارهای نیمرسانای نیتروژندار

نگارنده:

حمیدرضا علائی

استاد راهنما:

دکتر حسین عشقی

رساله دکتری فیزیک جهت اخذ درجه دکتری

بهمن ماه ۱۳۸۸

تقدیر و تشکر

سپاس بی پایان بدرگاه خداوند بزرگ مرتبه ای که به ما توانائی داد تا از اقیانوس بیکران دانشش بهره مند شویم. اوست پروردگاری بی همتا که انسان را از گلی بی مقدار آفرید آنگاه او را گوهر ایمان و شرافت دانش آموزی بخشید. اکنون که با یاری خداوند متعال، این دوره پرفراز و نشیب در حال پایان یافتن است ابتدا بر خود لازم می دانم که از مادر عزیز، همسر مهربان و پرتلاش و فرزندان دلبندم که یاریگر من در این مسیر بودند سپاسگزاری نمایم. وظیفه خود می دانم که از زحمات جناب آقای دکتر حسین عشقی استاد راهنمای محترم این رساله صمیمانه قدردانی نمایم. مسلماً راهنمائیهای اندیشمندانه و تلاش توأم با نظم ایشان در تحقق اهداف این رساله بسیار موثر و اساسی بود. همچنین وظیفه خود میدانم که از اساتید محترم دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود که در دروان آموزشی از محضر آنان بهره مند شدیم سپاسگذاری نمایم. نام نیک آنان عبارت است از: دکتر علی اکبر رجبی، دکتر محمدرضا سرکرده ای، دکتر حسین عشقی، دکتر محمد ابراهیم قاضی و دکتر حمید هراتی زاده. همچنین از زحمات آقای دکتر ایزدی فر ریاست محترم این دانشکده نیز تشکر می نمایم. در طی این چند ساله، همراهی و گفتمان علمی با هم دوره ایهای عزیز آقایان دکتر: محمد یونسی، اسماعیل عبدلی، محمدرضا شجاعی و حسن حسن آبادی بسیار ارزنده بود. یاد و نامشان را گرمی داشته سعادت مندی آنها را آرزو مندیم. با خواست و یاری پروردگار در این دوره فرصتی بوجود آمد که از ابتدای مهر ماه سال ۱۳۸۷ به مدت هفت ماه بمنظور انجام بخشی از پژوهشهای این رساله در کشور آلمان زندگی نمایم. در اینجا وظیفه خود میدانم که از نیک مردمانی که در آن دیار مرا یاری کردند بویژه از دعوت کننده و میزبان این دوره آقای پرفسور رالف ریدل رئیس دانشکده علوم مواد دانشگاه صنعتی دارمشتات و سایر پژوهشگران آن دانشکده بویژه آقای دکتر علیرضا براتی سپاسگذاری نمایم. همچنین از همکاری دلسوزانه آقای پرفسور دیمیتری پاولیدیز رئیس دانشکده مهندسی میکرو الکترونیک آن دانشگاه و همکاریانش در زمینه ساخت نمونه های مورد مطالعه نیز صمیمانه تشکر می نمایم. در پایان از هیئت محترم داوران: آقایان دکتر هادی عربشاهی عضو هیات علمی دانشگاه فردوسی مشهد، دکتر رشید ولی و دکتر سید احمد کتابی اعضای هیات علمی دانشگاه علوم پایه دامغان و دکتر محمد ابراهیم قاضی عضو هیات علمی دانشگاه صنعتی شاهرود به خاطر نقد، بررسی و داوری این پایان نامه سپاسگزاری می نمایم.

بیاد پدر عزیزم

اقرار نامه واگذاری حقوق :

دانشجو تأیید می نماید که مطالب مندرج در این رساله نتیجه تحقیقات خودش می باشد و در صورت استفاده از نتایج دیگران مرجع آن را ذکر نموده است.

کلیه حقوق مادی مترتب از نتایج مطالعات، آزمایشات و نوآوری ناشی از تحقیق، موضوع این رساله متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد .

هفدهم بهمن ماه ۱۳۸۸

چکیده

حضور **میدانهای الکتریکی** داخلی قوی در **نیمرساناهای نیتروژندار** سبب کاهش بازدهی قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی مبتنی بر این نیمرساناهای می شود. هدف ما در این رساله بررسی دقیقی از منشاء و آثار این میدانهاست که در دو بخش تجربی و نظری انجام گرفته است.

در بخش تجربی وجود **کرنشها و تنشها** را در لایه ای از GaN به ضخامت $2 \mu m$ مورد مطالعه قرار دادیم. این لایه را با آلایش سیلیکون بر روی زیرلایه ای از Sapphire به روش MOCVD (در دانشگاه صنعتی دارمشتات – آلمان). رشد داده و سپس مشخصه یابی نموده ایم. بررسی طیف رامان در این نمونه وجود کرنش را که وابسته به جابجائی قله متناظر با مد فونونی E_2 به میزان $\Delta\omega = 1/25 \text{ cm}^{-1}$ است مورد تایید قرار می دهد. برای تعیین مقدار تنش دو محوری در این نمونه از دو تکنیک XRD و پروفیل سنج قائم (به منظور اندازه گیری انحنای ساختار) استفاده کرده ایم. نتایج حاصل از XRD نشان دادند که لایه GaN دارای ساختار هگزاگنال با ثابتهای شبکه ای $a = 3.187 \text{ \AA}$ و $c = 5.1825 \text{ \AA}$ بوده و محاسبات نظری نشان دادند که این لایه رشد یافته دارای یک تنش دو محوری با بزرگی $0.175 \pm 0.03 \text{ GPa}$ می باشد. این در حالی است که داده های حاصل از انحنا سنجی، تنشی برابر $0.12 \pm 0.04 \text{ GPa}$ را به دست می دهد که با مقدار وابسته به تکنیک XRD سازگاری نزدیکی دارد. نتایج مذکور رابطه بین تنش و جابجائی رامان را برای این لایه به صورت :

$$\Delta\omega = 7/1 \pm 0.1 \text{ GPa} \sigma \text{ ارائه می دهد.}$$

در بخش نظری ابتدا بزرگی کرنشهای تراکمی در سطح مشترک لایه های $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ و سپس قطبش پیزوالکتریکی ناشی از این میدانها را برحسب کسر مولی ایندیم محاسبه نمودیم. محاسبات ما نشان می دهند که میدان پیزوالکتریک در این گونه سیستمها به ازای کسر مولی ایندیم (x) تا 0.25 به 4 MV/cm می رسد. تحلیل نظری ما نشانگر آن است که استفاده از این مدل همراه با در نظر گرفتن میدانهای خودبخودی (ناشی از تقارن ضعیف بلوری در ساختارهای ورتسایت) به طور موفقیت آمیزی می تواند نتایج تجربی گزارش شده در نمونه های تک چاه کوانتومی را توصیف نماید.

معلوم شده است که حضور این میدانها می تواند به اثر حبس کوانتومی استارک که یکی از عوامل اصلی محدود کننده بازدهی قطعات نور گسیل مبتنی بر نیمرساناهای نیتروژندار است منجر شود. این اثر می تواند به کاهش شدت نور و انتقال بسوی قرمز در طیف تابشی این قطعات بیانجامد. ما در فصل پایانی به طور نظری وابستگی انتقال بسوی قرمز ناشی از **اثر حبس کوانتومی استارک** را بر حسب بزرگی عرض چاههای کوانتومی چندگانه در سیستم $\text{GaN}/\text{In}_{0.13}\text{Ga}_{0.87}\text{N}/\text{GaN}$ با استفاده از مدل اختلالی مورد بررسی قرار داده ایم. در این راه ابتدا توابع موج و سپس ترازهای انرژی متناظر با آنها را بدست آورده، آنگاه به کمک این مدل نشان داده ایم که اختلال مرتبه اول، $\Delta E^{(1)}$ در تغییر بزرگی انرژی گذار صفر بوده لکن وجود جمله مربوط به اختلال مرتبه دوم می تواند به طور موفقیت آمیزی موقعیت قله های انرژی در طیف فتولومینیسانس این سیستم را تفسیر نماید. محاسبات ما بیانگر آن است که در نظر گرفتن جرم موثر الکترونها و حفره ها به عنوان تابعی از بزرگی عرض چاه $m^*(z)$ ، به برآش بهتر داده های تجربی و نتایج نظری در مقایسه با حالتی که جرم این حاملها ثابت در نظر گرفته شوند می انجامد.

کلید واژه ها: نیمرساناهای نیتروژندار، ساختارهای ورتسایت، کرنش، تنش، میدانهای الکتریکی داخلی، چاههای کوانتومی، اثر حبس کوانتومی استارک.

مقالات مستخرج از رساله:

۱- مقاله ژورنالی: Physics Letters A 374 (2009) 66-69

" Theoretical Modeling for Quantum-Confined Stark Effect due to Internal Piezoelectric Fields in GaInN Strained Quantum Wells"

۲- مقاله ژورنالی: Chinese Journal of physics (2009)

" Thermal stress and strain in GaN epitaxial layer grown on sapphire substrate by MOCVD method"

۳- مقاله کنفرانسی :

شانزدهمین همایش بلورشناسی و کانی شناسی ایران (آبانماه ۱۳۸۷) - دانشگاه گیلان

"محاسبه بزرگی میدان الکتریکی داخلی کلی در ساختارهای ناهمگون $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ با

تبلور ورتسایت"

فصل اول: مروری بر مقالات.....	۱
۱-۱ گالیم نیتراید و ناراستیهای بلوری.....	۲
۲-۱ میدانهای الکتریکی داخلی در گالیم نیتراید.....	۴
فصل دوم: مروری بر مفاهیم پایه.....	۹
- مقدمه.....	۱۰
۱-۲ ساختار نواری.....	۱۰
۲-۲ گاف انرژی.....	۱۲
۳-۲ ناراستیهای بلوری.....	۱۳
۴-۲ ناخالصیها.....	۱۳
۵-۲ مواد آلیاژی.....	۱۴
۶-۲ ساختار بلوری نیمرساناهای نیتروژندار.....	۱۴
۷-۲ ساختارهای با چاه کوانتومی در نیمرساناهای نیتروژندار.....	۱۷
۸-۲ خواص نوری ساختارهای کوانتومی نیمرسانای نیتروژندار.....	۲۰
۹-۲ خواص الکتریکی ساختارهای کوانتومی نیمرسانای نیتروژندار.....	۲۰
فصل سوم: رشد و مشخصه یابی نمونه ها.....	۲۶
۱-۳ رشد نمونه به روش رسوب گذاری بخار شیمیایی (MOCVD).....	۲۷
۱-۱-۳ زیر لایه.....	۲۹
۲-۱-۳ رشد به روش MOCVD.....	۳۰

۳۵	طیف سنجی پراش پرتو X (XRD)
۳۵	۱-۲-۳ تولید و کاربرد پرتو X
۳۶	۱-۲-۳ طیف نگاری به روش XRD
۴۳	۳-۳ طیف سنجی فوتو الکترونیهای پرتو X (XPS)
۴۳	۱-۳-۳ اصول نظری XPS
۴۵	۲-۳-۳ طیف نگاری به روش XPS
۴۸	۴-۳ تصویر برداری با میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM)
۴۸	۱-۴-۳ عملگری میکروسکوپ الکترونی روبشی
۵۰	۲-۴-۳ روش کار با میکروسکوپ الکترونی روبشی
۵۰	۳-۴-۳ کاربردهای میکروسکوپ الکترونی روبشی
۵۱	۵-۳ طیف سنجی رامان
۵۲	۱-۵-۳ فونونهای نوری و صوتی
۵۶	۲-۵-۳ روش تجربی طیف سنجی رامان برای نیمرساناهای نیتروژندار

فصل چهارم: لایه نشانی GaN به روش MOCVD بر روی زیرلایه Sapphire و بررسی

۶۲	تنشها و کرنشهای گرمائی در آن
۶۳	۱-۴ معرفی نمونه و اهداف مطالعه
۶۴	۲-۴ جزئیات رشد لایه ها
۶۵	۳-۴ مشخصه یابی ساختاری
۶۵	۱-۳-۴ بررسی ترکیبات عنصری نمونه به روش XPS
۶۶	۲-۳-۴ بررسی ساختاری نمونه توسط طیف سنجی پراش پرتو X
۷۰	۳-۳-۴ بررسی کیفی تنشها و کرنشهای درونی ساختار به روش طیف سنجی رامان

۴-۳-۴ بررسی کمی تنشها و کرنشهای درونی ساختار ۷۱

۴-۴ نتیجه گیری ۷۵

فصل پنجم: بررسی نظری میدانهای الکتریکی داخلی در ساختارهای ناهمگون ورتسایت

.....GaN/In_xGa_{1-x}N ۷۷

۱-۵ تعیین بردار قطبش و میدان پیزوالکتریکی در ساختارهای ناهمگون GaN/In_xGa_{1-x}N با

ساختار بلوری ورتسایت ۷۸

۲-۵ تعیین بزرگی میدان الکتریکی خودبخودی در ساختارهای ناهمگون چاه کوانتومی

.....GaN/In_xGa_{1-x}N/GaN ۸۴

۳-۵ محاسبه بزرگی میدان الکتریکی کل در ساختارهای ناهمگون مبتنی بر چاههای کوانتومی

.....GaN/In_xGa_{1-x}N/GaN ۸۶

نتیجه گیری ۸۷

فصل ششم: مطالعه اثر حبس کوانتومی استارک ناشی از میدانهای پیزوالکتریکی در

ساختارهای GaN /InGaN /GaN با چاههای کوانتومی چندگانه ۸۸

۱-۶ معرفی نمونه و اهداف مطالعه ۸۹

۲-۶ تعیین شکل توابع موج و ویژه مقادیر انرژی در ساختارهای با چاه کوانتومی یگانه متناهی

.....GaN /InGaN /GaN ۹۲

۳-۶ محاسبه اثر حبس کوانتومی استارک در چاه(های) کوانتومی متناهی ۹۴

۱-۳-۶ جرم موثر ثابت ۹۴

۲-۳-۶ جرم موثر وابسته به عرض چاه $m^*(z)$ ۹۹

نتیجه گیری ۱۰۰

مراجع ۱۰۱

فهرست اشکال

صفحه	عنوان
۵	شکل (۱-۱): نمایش صفحات بلوری مختلف در ساختارهای ششگوشی.
۶	شکل (۲-۱): نمودار تغییرات بزرگی انتقال بسوی قرمز بر حسب بزرگی میدان الکتریکی در یک چاه کوانتمی ۳۰ آنگسترومی که با استفاده از دو روش اختلالی و وردشی بدست آمده اند.
۷	شکل (۳-۱): نمودار مجذور همپوشانی توابع موج (احتمال بازترکیبها) که بیانگر شدت تابش نیز می باشد در چاههای ۳۰ و ۱۰۰ آنگسترومی نشان داده شده است.
۸	شکل (۴-۱): مقایسه نتایج تجربی و نظری تغییرات قله طیف فوتولومینسانس بر حسب عرض چاه در حضور میدانهای الکتریکی داخلی نسبتا ضعیف (سمت چپ) و یک میدان الکتریکی خیلی قویتر (سمت راست).
۱۱	شکل (۱-۲): ترازهای انرژی دو اتم (الف) و نوارهای انرژی تعداد زیادی اتم در یک جامد (ب).
۱۲	شکل (۲-۲): الف) نیمرسانائی با گاف انرژی مستقیم، ب) نیمرسانائی با گاف انرژی غیر مستقیم.
۱۵	شکل (۳-۲): نحوه قرار گرفتن اتمها در ساختار الف) ورتسایتس و ب) زینک بلند.
۱۶	شکل (۴-۲): نحوه قرار گرفتن اتمها در ساختار تنگ پکیده WZ (سمت راست) و ساختار تنگ پکیده ZB.
۱۶	شکل (۵-۲): نحوه چینش صفحات در ساختار تنگ پکیده WZ (سمت راست) و ساختار تنگ پکیده ZB (سمت چپ).
۱۹	شکل (۶-۲): نحوه تشکیل گاز الکترونی دویعدی در یک ساختار ناهمگون.
۱۹	کل (۷-۲): الف) تصویر لایه ها در یک ساختار ناهمگون یک چاه کوانتمی، ب) ترازهای

	کوانتیده انرژی در چاه.
۲۰	شکل (۸-۲): تصویری از لایه نشانی و ساختار نواری یک چاه کوانتومی چندگانه.
۲۲	شکل (۹-۲): اثر حبس کوانتومی استارک در یک چاه کوانتومی: کاهش انرژی ترازهای انرژی و همچنین انتقال تابع توزیع احتمال حضور حاملها به طرف دیواره های چاه بخوبی قابل مشاهده است
۲۳	شکل (۱۰-۲): طرح شماتیکی از تغییر شکل کشسان لایه ها رشد ناشی از عدم انطباق ثابتهای شبکه ای قبل و بعد از اتصال لایه و زیرلایه. a_s معرف ثابت شبکه زیرلایه و a_l معرف ثابت شبکه لایه است.
۲۵	شکل (۱۱-۲): نمودار شماتیک ساختارهای بلوری Ga-face و N-face در حالت Ga-face بالاترین صفحه بلوری موازی با صفحه (۰۰۰۱) با اتمهای Ga پوشیده شده و در حالت N-face با اتمهای N پوشیده شده است.
۳۲	شکل (۱-۳): طرحی ساده از بخش داخلی محفظه سیستم رشد MOCVD که رسوب گذاری مواد واکنشگر را بر روی ویفر در حال چرخش نشان می دهد.
۳۳	شکل (۲-۳): (الف) طرح شماتیک (ب) تصویر حقیقی سیستم رشد برآراستی MOCVD
۳۵	شکل (۳-۳): طرح شماتیک یک منبع تولید پرتوهای X و اجزا مختلف آن.
۳۷	شکل (۴-۳): بازتاب براگ از صفحات بلوری و تداخل سازنده پرتوهای بازتابیده.
۳۸	شکل (۵-۳): طرحی ساده از پراش پرتو X در اسکن $2\theta - \theta$
۳۸	شکل (۶-۳): تصاویری از دستگاههای طیف سنج پراش پرتو X که در دانشگاه صنعتی دارمشتات آلمان برای مشخصه یابی نمونه مورد مطالعه از آن استفاده شد.
۳۹	شکل (۷-۳): طیف XRD نمونه مورد مطالعه. محور افقی نمایشگر زاویه 2θ و محور قائم شدت پرتوهای پراشیده را نشان می دهد.

۴۱	شکل (۳-۸): طرح پراش سه شبکه بلوری، نمونه با کیفیت مطلوب (بدون کرنش)، دارای کرنش کششی یکنواخت (شکل میانی) و نمونه با کیفیت پایین (شکل پایینی) که دارای طیف پهن می باشد.
۴۲	شکل (۳-۹): نمایشی از یک قله در طیف پراش X که کمیت $FWHM$ از نظر بزرگی و موقعیت مکانی در آن نشان داده شده است.
۴۳	شکل (۳-۱۰): طرحی از پدیده فوتوالکتریک در اتم گالیم.
۴۴	شکل (۳-۱۱): موقعیت ترازهای انرژی اتم اورانیوم نسبت به تراز فرمی آن.
۴۵	شکل (۳-۱۲): طرحی از یک آنالیزور الکترونی در سیستم XPS که الکترونها را بر حسب میزان انرژی جنبشی از یکدیگر تفکیک می کند.
۴۶	شکل (۳-۱۴): دور نمایی از سیستم رشد، محفظه رابط مرکزی و سیستم مشخصه یابی XPS .
۴۷	شکل (۳-۱۵): نمایی از سیستم مشخصه یابی XPS و بعضی از اجزا آن.
۴۹	شکل (۳-۱۶): طرحی از یک میکروسکوپ الکترونی روبشی و اجزای مختلف آن.
۵۲	شکل (۳-۱۷): زنجیره یک بعدی متشکل از دو اتم با جرمهای M_1 و M_2 و که در موقعیتهای A_1, A_2 به فاصله تعادلی a از هم قرار دارند.
۵۳	شکل (۳-۱۸): نمودار پتانسیل بین اتمهای همسایه در یک جامد بر حسب تابعی از فاصله بین اتمی.
۵۵	شکل (۳-۱۹): منحنیهای پاشیدگی برای فونونهای نوری و صوتی در منطقه اول بریلوئن.
۵۸	شکل (۳-۲۰): تصویر شماتیک از پراکندگی فونونی در ساختارهای مکعبی و ورتسایت.
۵۸	شکل (۳-۲۱): تصویر سلول واحد در شبکه وارون یک ساختار ورتسایت.
۶۱	(۳-۲۲): پیکربندی $Z(y,y)Z$ در طیف سنج رامان. با این پیکربندی می توان مد فونونی

	اِپتیکِی عرضی E_2^H را مورد بررسی قرار داد.
۶۳	شکل (۱-۴): تصاویر شماتیک (سمت چپ) و SEM (سمت راست) نمونه مورد مطالعه.
۶۶	شکل (۲-۴): طیف XPS نمونه مورد مطالعه. در این طیف قله های طیفی گالیم و نیتروژن به عنوان عناصر اصلی در ترکیب نمونه و اکسیژن، نیتروژن و کربن به مقدار جزئی به عنوان ناخالصی دیده می شوند. E_f موقعیت انرژی فرمی را نشان می دهد.
۶۷	شکل (۳-۴): طیف XRD در نمونه GaN که قله های طیفی متناظر با صفحات بلوری (۱۰۰۰)، (۰۰۰۲) و (۰۰۰۴) در آن دیده می شوند.
۷۱	شکل (۴-۴): طیف رامان نمونه که موقعیت قله طیفی وابسته به مد فونونی E_2^H متعلق به لایه GaN بصورت خط چین نشان داده شده است.
۷۳	شکل (۵-۴): تصویر شماتیک از نمونه های مورد مطالعه.
۷۴	شکل (۶-۴): نمودار انحنای سطحی نمونه های مورد مطالعه.
۷۴	شکل (۷-۴): تصویر شماتیک نمونه که پارامترهای انحنا (d و H) در آن دیده می شوند.
۷۹	شکل (۱-۵): نمایش برخی از عناصر تانسور کنش در وجوه مختلف یک بلور.
۸۲	شکل (۲-۵): نمودار تغییرات قطبش خودبخودی و قطبش پیزوالکتریک بر حسب تغییرات کسر مولی ایندیم در ساختار $GaN/In_xGa_{1-x}N$.
۸۳	شکل (۳-۵): نمودار تغییرات میدان پیزوالکتریک بر حسب تغییرات کسر مولی ایندیم در ساختار $GaN/In_xGa_{1-x}N$.
۸۴	شکل (۴-۵): تغییرات میدان الکتریکی بر حسب کسر مولی ایندیم برای نمونه های با چاههای کوانتومی $GaN/In_xGa_{1-x}N/GaN$.
۸۵	شکل (۵-۵): نمودار تغییرات میدان الکتریکی خودبخودی و پیزوالکتریک بر حسب کسر مولی ایندیم. دایره های توپر مقادیر تجربی میدان برای نمونه های جدول ۱-۵ هستند.

۸۶	<p>شکل (۵-۶): نمودار تغییرات میدان الکتریکی خودبخودی، میدان پیزوالکتریک و میدان الکتریکی کل بر حسب کسر مولی ایندیم که به روش محاسباتی بدست آمدند. دایره های توپر نیز نتایج تجربی را نشان می دهند.</p>
۹۱	<p>شکل (۶-۱): نتایج طیف نگاری فوتولومنیسانس برای چهار نمونه GaN/InGaN/GaN با چاه کوانتومی به عرضهای متفاوت ۲۰ تا ۱۲۰ آنگستروم. مربعهای سفید انرژی گذار نمونه ها در حضور یک چشمه تابشی با شدت پایین و مربعهای سیاه انرژی گذار نمونه ها یک چشمه تابشی بسیار پر شدت است. خط افقی در انرژی $2/84 \text{ eV}$ وابسته به پیش بینی نظری انرژی گذار بین لبه نوار رسانش و نوار ظرفیت در InGaN کپه ای است.</p>
۹۲	<p>شکل (۶-۲): چیدمان لایه ها و ترازهای انرژی مجاز در نمونه مورد مطالعه که یک ساختار GaN /InGaN /GaN با یک چاه کوانتومی متناهی است.</p>
۹۷	<p>شکل (۶-۳): نمودار تغییرات $f(z)$ بر حسب Z برای چاههای کوانتومی متناهی (خط چین) و نامتناهی (خط توپر). نمودار الصافی نشانگر تغییرات $f(z)/z^4$ بر حسب Z برای چاههای مذکور است.</p>
۹۸	<p>شکل (۶-۴): تغییرات انرژی گذار در طیف فوتولومنیسانس بر حسب تابعی از عرض چاههای کوانتومی در سیستم GaN/InGaN/GaN. مربعهای توپر و توخالی بترتیب متناظر با قله های طیف فوتولومنیسانس تجربی در شرایط برانگیختگی بالا و پایین و منحنیهای خط چین و خط تقطه چین انرژیهای گذار محاسباتی را در حالتی که جرم موثر حاملها ثابت در نظر گرفته شده نشان می دهد. منحنیهای توپر ضخیم و نازک نیز انرژیهای گذار محاسباتی را در حالتی که جرم موثر حاملها وابسته به عرض چاه در نظر گرفته شده اند نشان می دهند.</p>
۱۰۰	<p>شکل (۶-۵): نمودار تغییرات جرم موثر حاملها بر حسب تابعی از عرض چاه کوانتومی در نمونه.</p>

۱۳	جدول (۱-۲): گروهی از نیمرساناهای مرکب. حرف (d) معرف مستقیم بودن و حرف (i) معرف غیر مستقیم بودن گاف نواری ماده می باشد.
۱۷	جدول (۲-۲): برخی از ویژگیهای نیمرساناهای نیتروژندار AlN , GaN و InN شامل گاف نواری (در دماهای پایین و دمای اتاق)، ثابتهای شبکه و ثابت دی الکتریکی در ساختارهای WZ و ZB .
۶۸	جدول (۱-۴): نتایج حاصل از طیف نگاری پراش پرتو X از صفحات بلوری مختلف که طیف آن در شکل (۴-۴) نشان داده شده است. نتایج بترتیب شامل زاویه 2θ ، شدت پرتوهای پراشیده و شاخصهای میلر متناظر با صفحات بلوری مختلف می باشد.
۶۹	جدول (۲-۴): روابط بین شاخصهای میلر و فاصله بین صفحات بلوری (d_{hkl}) در سیستمهای بلوری مختلف.
۸۱	جدول (۱-۵): برخی پارامترهای فیزیکی InGaN , GaN که در محاسبه کرنش و قطبش پیزوالکتریکی این لایه ها بکار می آیند. a ثابت شبکه، e_{31} و e_{33} ثابتهای پیزوالکتریکی و C_{33} ثابت سختی کشسانی مواد مورد نظر هستند.
۸۳	(جدول ۲-۵): میزان کسر مولی ایندیم در نمونه های مورد مطالعه که همگی در ساختار خود دارای یک چاه کوانتومی $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ هستند [۶۱].
۸۹	جدول (۱-۶): برخی از ویژگیهای ساختاری نمونه های مورد مطالعه.

فصل اول

مروری بر مقالات

۱-۱ گالیم نیتراید و ناراستیهای بلوری

گالیم نیتراید و نیمرساناهای سه تائی مبتنی بر آن مانند InGaN و AlGaIn در کاربردهای صنعتی در مقایسه با دیگر نیمرساناهای با گاف انرژی مستقیم و پهن مانند SiC از برتری چشمگیری برخوردارند. از جمله این برتریها می توان به امکان تهیه این مواد با رسانندگی نوع n و p و نیز امکان تغییر گستره گاف انرژی در محدوده طیفی $6/2 \text{ eV}$ تا $0/7 \text{ eV}$ (شامل ناحیه طیفی فرو سرخ تا فرابنفش) اشاره کرد. این ویژگیها سبب شدند که از این نیمرساناها بطور گسترده در قطعات اپتوالکترونیکی (شامل گسیلنده ها و سلولهای خورشیدی) همچنین در قطعات الکترونیکی که در دماهای بالا و با توان بالا کار می کنند (مثل ترانزیستورهای اثر میدانی پرتوان و پر سرعت) و نیز در محیطهای فعال شیمیایی (جائیکه حسگرها و آشکارسازها کار میکنند) استفاده شود.

تهیه لایه ای از گالیم نیتراید در حدود هفتاد سال پیش توسط جانسون و همکارانش [۱] با عبور آمونیاک از روی گالیم داغ به دست آمد. سپس جوزا و همکارانش [۲] به بررسی ساختار بلوری و ثابت شبکه گالیم نیتراید پرداختند و ماروسکا و همکارانش برای نخستین بار در سال ۱۹۳۷ از آرایش منیزیم در گالیم نیتراید برای تابش نور بنفش در دیوهای استفاده کردند [۳].

دو دهه بعد گرمیس و همکارانش [۴] در سال ۱۹۵۹ همان روش را برای تولید بلورهای کوچک گالیم نیتراید بکار بردند و طیف فوتولومینسانس آن را مورد بررسی قرار دادند. در سال ۱۹۶۹ ماروسکا و همکارانش [۵] روش انتقال بخار کلراید را برای ساخت لایه ای از گالیم نیتراید روی زیر لایه Al_2O_3 بکار بردند. تمامی لایه های گالیم نیتراید ساخته شده تا آن زمان با وجود هیچگونه آرایش عمدی دارای رسانندگی نوع n بودند. انتشار نتایج تحقیقات ماروسکا منجر به راه اندازی آزمایشگاهها و انجام تحقیقات در این زمینه توسط محققان دیگر شد. در سال ۱۹۷۲ اولین دیود باگسیل نور آبی از طریق آرایش گالیم نیتراید با عنصر روی به دست آمد [۶]. این دیود بسته به غلظت روی می توانست رنگهای آبی، سبز، زرد و قرمز را از خود گسیل کند.

تلاشهای زیادی برای تهیه گالیم نیتراید نوع p انجام شد تا اینکه آکاساکی و آمانو در سال ۱۹۸۹ موفق به ساخت این نوع از گالیم نیتراید شدند [۷] در واقع این یک کشف تصادفی بود. آنها در حین بررسی طیف کاتدولومینسانس گالیم نیتراید آرایش یافته با منیزیم دریافتند که درخشندگی نمونه ها با افزایش تعداد دفعات روبش سطح نمونه (به کمک باریکه الکترونی) افزایش می یابد. این

پدیده شگفت آور به وسیله ونچتن و همکارانشان اینگونه تفسیر شد که در حین فرآیند کاتدولومنیسانس، ترازهای پذیرنده کم عمق منیزیم که در حدود ۰/۱۶ الکترون ولت بالای نوار ظرفیت آن می باشند الکترونها را با کسب انرژی از باریکه الکترونی بکار رفته در فرایند کاتدولومنیسانس آزاد می کنند [۸]. ادامه تحقیقات توسط ناکامورا آشکار کرد که بازپخت گالیم نیتراید آلائیده به منیزیم در دمای بالاتر از ۷۵۰ درجه سانتیگراد در حضور گاز نیتروژن یا خلا رسانش ماده را به نوع p تبدیل می کند و بدین ترتیب اولین پیوندگاه p-n و در نتیجه اولین قطعه نورگسیل مبتنی بر گالیم نیتراید ساخته شد [۹].

یکی از مشکلاتی که در ساخت قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی مبتنی بر نیمرساناهای نیتروژندار و از جمله گالیم نیتراید وجود دارد یافتن زیرلایه ای مناسب برای آنهاست. در ابتدا از زیرلایه هائی چون GaAs و SiC استفاده می شد که به کارگیری این زیرلایه ها به ایجاد نواقص و دررفتگیهای فراوان منجر می گردید. از اوایل دهه ۸۰ تلاشهای زیادی برای رفع این مشکلات آغاز شد. سرانجام گروهی از پژوهشگران با به کار بردن یک لایه واسط آلومینیم نیتراید که در دمای پایین رشد یافته بود توانستند لایه های نازک گالیم نیتراید را با کیفیت بالا و با خواص الکتریکی و اپتیکی مناسب بر روی بستر Al_2O_3 رشد دهند [۱۰]. بعدا در اوایل سال ۱۹۹۰ لایه واسطی از گالیم نیتراید بر روی لایه واسط ضخیمی از جنس خودش در دمای پایین رشد داده شد. این امر به تهیه لایه ای از گالیم نیتراید نوع n با کیفیت بلوری بالا منجر شد که تراکم حاملها در آن نیز بسیار بالا بود [۱۱] در سال ۱۹۹۴ ناکامورا و همکارانش توانستند دیود نور گسیل با ساختار همگون و درخشنده گالیم نیتراید را تولید کنند [۱۲] و یکسال بعد دیود نور گسیل درخشنده ای با ساختار چاه کوانتمی یگانه ای از GaN/InGaN ساخته شد که به طرز شگفت آوری بازده و تکفامی دیودهای گسیلنده نور آبی را افزایش داد [۱۳].

در زمینه رشد لایه های گالیم نیتراید، ایندیم نیتراید و آلومینیم نیتراید بر روی زیر لایه Al_2O_3 به روش MOCVD آماچر، فیسخر و برگ مایر به همراه همکارانشان در موسسات تحقیقاتی مختلف آلمان تحقیقات جالب توجهی انجام دادند [۱۴]. تحقیقات آنها بیشتر معطوف به پایداری گرمائی و نفوذ آلاینده های ناخواسته ای چون. هیدروژن و ترکیباتش (مثل هیدرو کربنها و هیدراتهای نیتروژندار) به درون لایه ها نیمرسانای نیتروژندار بود. آنها گالیم نیتراید، ایندیم نیتراید و آلومینیم

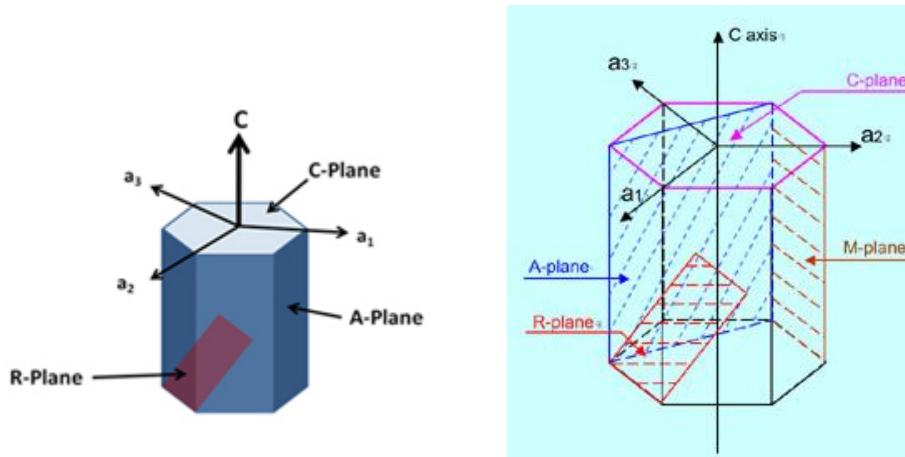
نیتراید را بصورتهای آمورف، بس بلوری و تک بلور در شرایط مختلف رشد، شامل دمای ۴۰۰ تا ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد برای زیرلایه های و در غلظتهای متفاوت گاز نیتروژن رشد دادند و با تغییر شار پیش ماده ها و در نتیجه به ازای آهنگهای متفاوتی که برای رشد انتخاب کردند خلوص بلور را مورد بررسی قرار دادند. آنها دریافتند وقتی که دمای رشد از ۱۱۰۰ تا ۶۵۰ درجه سانتیگراد کاهش می یابد میزان ناخالصی بصورت هیدروکربن در لایه گالیم نیتراید بصورت نمائی از $2 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ تا $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ کاهش می یابد

۲-۱ میدانهای الکتریکی داخلی در گالیم نیتراید

یکی دیگر از مشکلاتی که در رشد لایه های GaN وجود دارد عدم تطابق ثابتهای شبکه لایه و زیرلایه و تفاوت در ضرایب انبساط گرمائی آنهاست. علاوه بر این موارد وجود تقارن بلوری ضعیف در ساختار ورتسایت می تواند به ایجاد میدانهای الکتریکی داخلی منجر شوند. وجود میدانهای الکتریکی داخلی سبب بروز پدیده اثر حبس کوانتومی استارک شده که تاثیرات نامطلوبی همچون کاهش بازدهی اپتیکی و انتقال بسوی قرمز در طیف تابش گسیلی از این نیمرساناها می گردد که در باره نظریه های مرتبط با این موضوعات در بخش ۲-۹ به تفصیل صحبت خواهیم کرد. همچنین از آنجا که قسمتی از کار پژوهشی ما در این زمینه بوده است به این موضوع در فصلهای پنجم و ششم خواهیم پرداخت.

کارهای نظری انجام شده در زمینه میدانهای الکتریکی داخلی در نیمرساناهای نیتروژندار بیشتر شامل مدلسازیهایی است که طی آن سعی شده برحسب ویژگیهای خاص ساختارهای ورتسایت (از جمله تقارن بلوری ضعیف و نیز خواص پیزوالکتریکی در نمونه های چند لایه ای) بزرگی این میدانها را محاسبه کنند. در کارهای تجربی علاوه بر آنکه سعی شده بزرگی این میدانها و تاثیرشان بر کرائی قطعات مربوطه تعیین شوند هم چنین سعی شده است نمونه هائی با روشهای نوین به گونه ای رشد یابند که آثار نامطلوب این میدانها در آنها به حداقل ممکن برسد که از جمله می توان به کارهای تجربی تری پاتی، سونی و همکارانش اشاره کرد که در ابتکاری جالب بمنظور کاهش اثرات نامطلوب میدانهای الکتریکی داخلی بر عملگری قطعات نیمرسانای نیتروژندار اقدام به رشد GaN بر روی زیرلایه های Al_2O_3 با جهت گیری ترجیهی بلوری متفاوتی نمودند [۱۵]. زیرلایه های به کار برده

شده دارای جهت گیری بلوری متداول (۰۰۰۱) موسوم به C-plan، جهت گیری بلوری $(11\bar{2}0)$ موسوم به A-plan، $(\bar{1}102)$ موسوم به R-plan و جهت گیری بلوری $(10\bar{1}0)$ موسوم به M-plan بودند (شکل ۱-۱). در این لایه نشانی لایه های گالیم نیتراید به روش MBE رشد یافته بودند که به تبعیت از زیرلایه خود، همان جهت گیریهای کریستالی زیرلایه را دارا شدند.



شکل (۱-۱): صفحات بلوری مختلف در ساختارهای ششگوشی

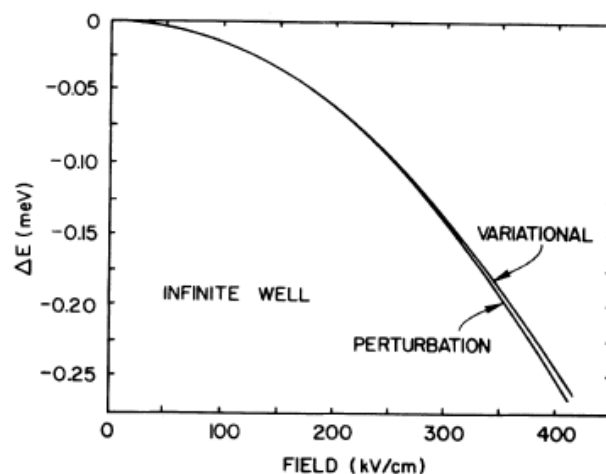
آنها برای تعیین بزرگی آثار پیزوالکتریکی و انتقال قرمز ناشی از اثر حبس کوانتومی استارک نمونه ها را با روش طیف سنجی رامان و طیف سنجی فوتولومینسانس مورد بررسی قرار دادند. نتایج آنها حاکی از این بود که گذار اکسیتونی در دماهای پایین (در حدود ۱۰ کلوین) در نمونه های C-plan دارای کمترین انرژی (۳/۴۹۱ الکترون ولت) و در نمونه های M-plan دارای بیشترین انرژی (۳/۵۲۲ الکترون ولت) می باشد. کوچکتر بودن انرژی گذار در نمونه های C-plan نسبت به سایر نمونه ها حاکی از بیشترین میزان انتقال بسوی قرمز در طیف تابش گسیلی آنها است و این مطلب بیانگر این است که در این نمونه ها میدانهای الکتریکی داخلی تاثیر قویتری بر حاملهای بار (الکترونها و حفره ها) دارند. به عبارت دیگر اثر حبس کوانتومی استارک در این نمونه ها قویتر از نمونه های A-plan، R-plan و M-plan (که به آنها نمونه های نیمه قطبی گویند) می باشد.

بعدا گروههای دیگری از محققان از جمله دن باآرس و همکارانش [۱۶] مشابه با همین نمونه ها را با روش MOVPE رشد دادند و این موضوع را هم بصورت تجربی و هم بصورت نظری مورد بررسی قرار دادند، نیوبرت و همکارانش [۱۷] نمونه های مشابهی را بر روی زیر لایه Si با جهتگیری

ترجیهی (۱۱۱) و بکار بردن دو لایه واسط SiN و AlN به روش MOCVD رشد دادند. آنها دریافتند که استفاده از این زیرلایه نیمه قطبی و لایه واسط SiN به میزان زیادی کیفیت ساختاری و ویژگیهای اپتیکی نمونه ها را بهبود می بخشد. تائو و همکارانش [۱۸] در نمونه های مبتنی بر چاههای کوانتومی چندگانه GaN/InGaN با جهتگیریهای C-plan و M-plan آثار پیزوالکتریکی را بصورت نظری و تجربی مورد بررسی قرار دادند. آنها دریافتند که شدت گذارهای تابشی با بزرگی کرنش تراکمی در صفحه لایه ها نسبت مستقیم و با کرنش عمود بر صفحه نسبت عکس دارد.

اهمیت میدانهای الکتریکی داخلی بر عملگری قطعات نیمرسانای نیتروژندار سبب انجام پژوهشهای نظری متعددی در این زمینه شده است. در مدلسازیهای نظری برای تعیین منشا بزرگی و میزان اثرگذاری این میدانها از روشهایی چون روش خودسازگار، روش وردشی و روش اختلالی استفاده شده است. در این روشها ابتدا توابع موج و انرژی نوارها مشخص شده سپس انرژی گذار بین نواری (که متناظر با طول موج قله در طیف فوتولومینسانس یا کاتدولومینسانس است) و نیز احتمال گذار بین نوارهای ظرفیت و رسانش (که متناظر با ارتفاع قله این طیف هاست) مشخص می شوند. از جمله این تحقیقات میتوان به موارد زیر اشاره کرد.

اولین کارهای نظری در این زمینه بوسیله باستارد و همکارانش [۱۹] در سال ۱۹۸۳ انجام شد. آنها با استفاده از روش اختلالی و روش وردشی اثر میدان پیزوالکتریکی را در ساختارهایی با یک چاه کوانتومی با عرض کمتر از ۲۰۰ آنگستروم مورد بررسی قرار دادند شکل (۱-۲).

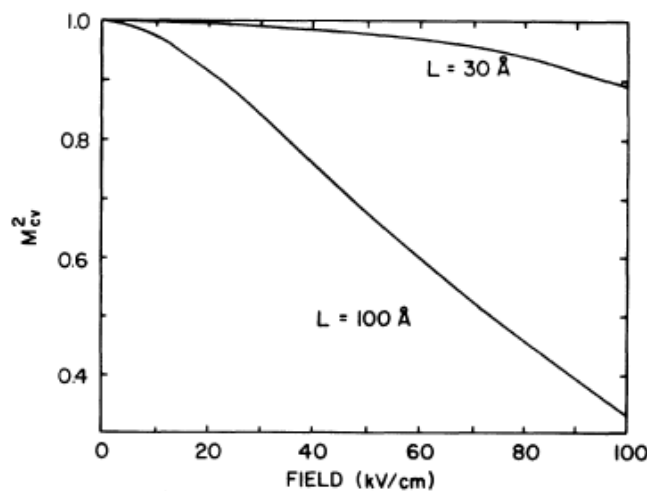


شکل (۱-۲): نمودار تغییرات بزرگی انتقال بسوی قرمز بر حسب بزرگی میدان الکتریکی در یک چاه کوانتومی ۳۰

آنگسترومی که با استفاده از دو روش اختلالی و وردشی بدست آمده اند [۱۹].

آنها دریافتند که در میدانهای الکتریکی ضعیف (بین ۵۰ تا ۱۰ kV/cm) نیز اثر حبس کوانتومی استارک سبب انتقال بسوی قرمز در این چاهها می شود.

آنها همچنین تاثیر بزرگی عرض چاههای کوانتومی را بر میزان انتقال به سوی قرمز و نیز بر مجذور همپوشانی توابع موج (احتمال باز ترکیبها) که بیانگر شدت تابش نیز می باشد مورد بررسی قرار داده و دریافتند که مقدار انتقال بسوی قرمز با مرتبه چهارم عرض چاه متناسب است. این نتایج در مورد میزان وابستگی مجذور همپوشانی توابع موج به بزرگی عرض چاه (برای چاههای با عرضهای ۳۰ و ۱۰۰ آنگستروم) در شکل ۱-۳ نشان داده شده است.

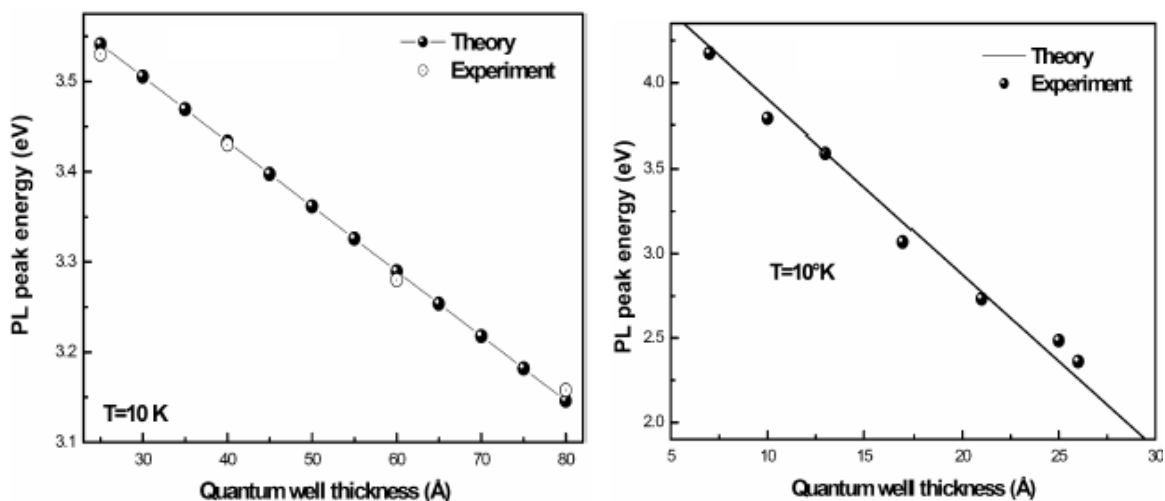


شکل (۱-۳): نمودار مجذور همپوشانی توابع موج که بیانگر شدت تابش (احتمال باز ترکیبها) نیز می باشد در چاههای ۳۰ و ۱۰۰ آنگسترومی نشان داده شده است [۱۹].

روش مرسوم دیگر برای بررسی نظری چنین ساختارهایی روش خودسازگار است. در این روش با حل خودسازگار معادله شرودینگر و معادله پواسن سعی می شود جواب بهینه ای برای تابع موج و طیف انرژی الکترونها و حفره ها (در نوار رسانش و نوار ظرفیت) بدست آید. در این روش پتانسیل حاصل از میدانهای الکتریکی داخلی مستقیماً وارد معادله شرودینگر می شود و با حل این معادله جوابی برای تابع موج بدست می آید. آنگاه از رابطه: $\rho(z) = e|\Psi(z)|^2$ چگالی حاملها را بدست آورده و با جایگذاری در معادله پواسن جوابی جدید برای تابع پتانسیل حاصل می شود. این حلقه با ورود تابع پتانسیل جدید به درون معادله شرودینگر تکرار می شود. با تکرار این حلقه رشته ای

از جوابها برای توابع موج حاملها و انرژی ذرات بدست می آید که در صورت همگرایی رشته رسیدن به جواب بهینه تضمین می شود.

مائی و پاتیل [۲۰] از نخستین پژوهشگرانی بودند که این روش را در ساختاری با یک چاه کوانتومی بکار بردند و موقعیت انرژی زیر نوارها را در آلیشهای متفاوت چاه بدست آوردند. گنزالس و همکارانش [۲۱] نیز با استفاده از روش وردشی طیف فوتولومنیسانس چاههای کوانتومی چندگانه GaN/Al_{0.17}Ga_{0.83}N با عرض چاه ۳۰ تا ۸۰ آنگسترم را در دمای ۱۰ کلوین یکبار در حضور میدانهای الکتریکی داخلی نسبتا ضعیف (با بزرگی ۷۱۹ kV/cm) و یکبار در حضور میدانهای الکتریکی داخلی بسیار قوی (با بزرگی ۱۰ MV/cm) محاسبه کردند. در شکل (۴-۱) نتیجه این محاسبات بصورت نمودار تغییرات قله طیف فوتولومنیسانس بر حسب عرض چاه در حضور این میدانهای الکتریکی نشان داده شده است.



شکل (۴-۱): مقایسه نتایج تجربی و نظری تغییرات قله طیف فوتولومنیسانس بر حسب عرض چاه در حضور یک میدانهای الکتریکی داخلی نسبتا ضعیف (سمت چپ) و یک میدان الکتریکی خیلی قویتر (سمت راست) [۲۱].

فصل دوم

مروری بر مفاهیم پایه

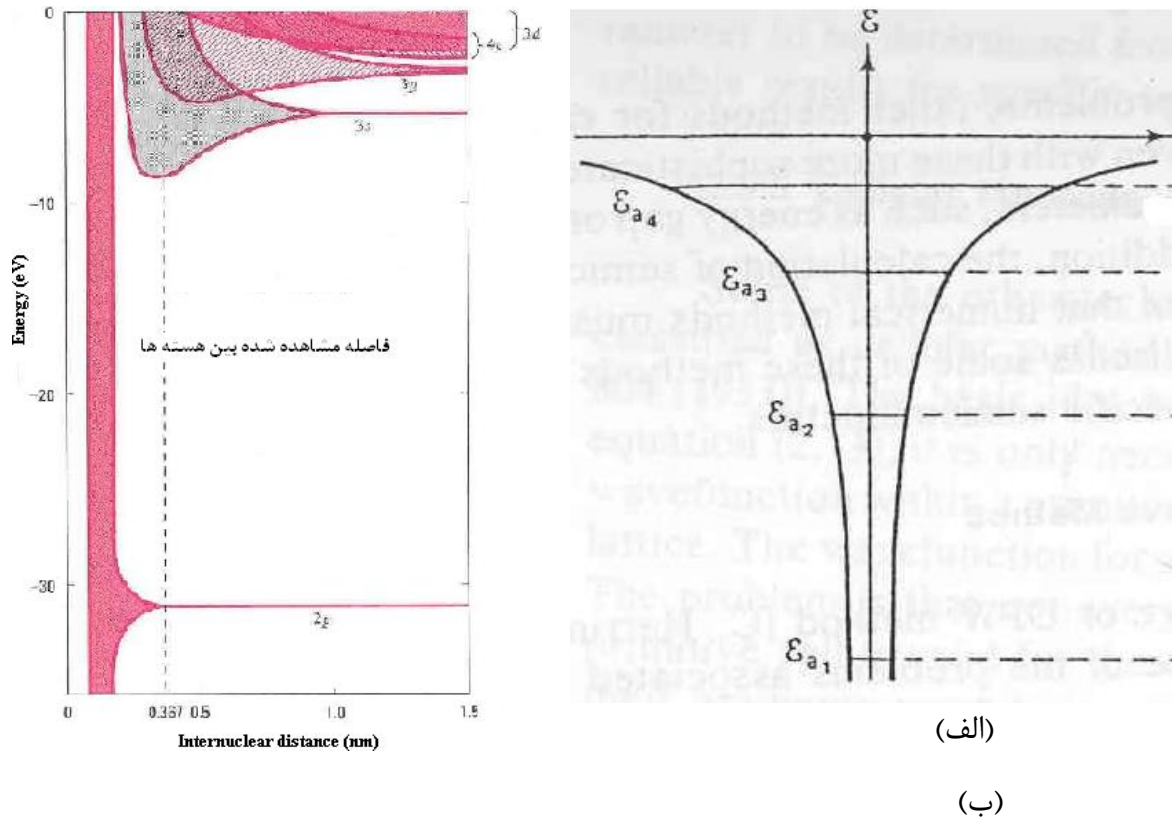
مقدمه

نیمرساناها گروهی از مواد هستند که رسانایی الکتریکی آنها بین فلزات و عایق ها قرار دارد. ویژگی مهم این مواد این است که خواص الکتریکی آنها مخصوصا رسانایی آنها با تغییر دما، برانگیختگیهای نوری و تغییر میزان ناخالصیها به طور قابل ملاحظه ای تغییر می کند. این قابلیت تغییر خواص الکتریکی و نیز توانائی آنها در تبدیل جریان الکتریکی به نور و یا بالعکس (تبدیل نور به جریان الکتریکی) سبب شده که از آنها برای مصارف عمومی و کاربردهای تحقیقاتی در زمینه الکترونیک و اپتولکترونیک به طور گسترده استفاده شود. اصولا موضوع اصلی مباحث الکترونیک مبتنی بر پاسخ ماده به میدانهای الکتریکی است در حالی که موضوع اصلی مباحث اپتولکترونیک بر پایه برهم کنش نور با ماده و به طور کلی فرآیندهای مرتبط با جذب و یا گسیل نور می باشد. از مهمترین مواد نیمرساناها که در پیدایش و پیشرفت میکروالکترونیک بسیار مفید بودند می توان از سیلیسیم و ژرمانیم نام برد. بعدها بتدریج با ارتقا تکنیکهای رشد توجه به نیمرساناهای مرکب بیشتر شد. این نیمرساناها از ترکیب عناصر ستونهای مختلف جدول تناوبی (شامل ترکیبات III-V ، II-VI ، IV- VI و IV-IV) بدست می آیند از ویژگیهای جالب توجه این نیمرساناها امکان تغییر گاف انرژی آنها با تغییر کسر مولی عناصر سازنده آنها ست.

۲-۱ ساختار نواری

وقتی درباره یک اتم منزوی صحبت می کنیم مسئله وجود ترازهای انرژی مطرح می شود که الکترونها به طور مشخص در این ترازها قرار می گیرند. اما این وضعیت برای دو اتم همانند وقتی که به قدر کافی به یکدیگر نزدیک باشند به گونه دیگری خواهد شد. در این حالت علاوه بر اینکه توابع موج الکترون ها در ترازهای مجاور با یکدیگر همپوشانی دارند ترازهای انرژی این سیستم دوتایی دارای تبهگنی نیز می باشد بدین معنی که هر الکترون در یک اتم دارای همتائی با همان ساختار انرژی در اتم دیگر است. این تبهگنی پایدار نبوده، در اثر برهمکنش بین دو اتم به پیروی از اصل طرد پائولی هر تراز انرژی به دو تراز با اختلاف انرژی بسیار کم از هم شکافته می شود. با افزایش تعداد اتم ها این مسئله تشدید می گردد مثلا در یک بلور با چگالی الکترونی 10^{23} cm^{-3} فاصله انرژی بین زیر ترازهای ایجاد شده خیلی کوچک (10^{-23} تا 10^{-22} الکترون ولت) خواهد بود به گونه ای که مجموعه این

زیرترازهای بسیار نزدیک بهم را می توان به صورت یک نوار انرژی در نظر گرفت. بین این نوارها نواحی موسوم به گاف انرژی به وجود می آیند که در آنها هیچ تراز انرژی مجازی وجود ندارد [۲۲]. در شکل ۱-۲ ترازهای انرژی یک اتم (الف) و تعداد زیادی اتم (ب) مشاهده می شود.

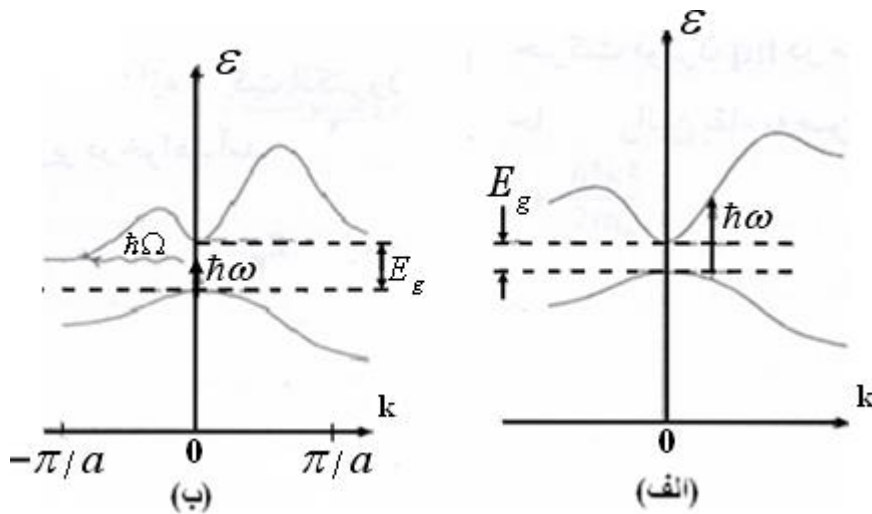


شکل (۱-۲): ترازهای انرژی در دو اتم (الف) و نوارهای انرژی تعداد زیادی اتم در یک جامد (ب) [۲۲].

لازم به ذکر است که پهنای نوارهای انرژی و نیز گاف انرژی بین آنها با توجه به نوع اتم ها متفاوت است. به گونه ای که یکسری از مواد، دارای گاف انرژی بسیار بزرگ هستند. در این مواد بدلیل فاصله زیاد بین نوار ظرفیت و نوار رسانش، احتمال حضور الکترون در نوار رسانش در دمای اتاق بسیار ناچیز است که به این مواد نارسانا گویند. با کمتر شدن گاف انرژی، ماده به سمت رسانا نزدیک می شود به گونه ای که در مواد رسانا فاصله بین نوار رسانش و نوار ظرفیت در دمای اتاق بسیار ناچیز و گاهی صفر است. در بین این دو دسته از مواد، دسته دیگری از مواد بنام نیمرساناها قرار دارند که گاف انرژی آنها در حد چند الکترون ولت است و در مواردی مثل AlN گاف انرژی به $6/2 \text{ eV}$ نیز می رسد.

۲-۲ گاف انرژی

نیمرساناها با توجه به ساختار انرژییشان به دو گروه نیمرساناهای های با گاف نواری مستقیم و نیمرساناهای با گاف نواری غیر مستقیم تقسیم بندی می شوند. وقتی در نیمرسانائی کمینه نوار رسانش در فضای تکانه هم موضع با بیشینه نوار ظرفیت ظاهر شود نیمرسانائی با گاف نواری مستقیم (شکل ۲-۲ الف) و وقتی که موضع آنها متفاوت باشد به نیمرسانای با گاف نواری غیر مستقیم موسوم است (شکل ۲-۲ ب).



شکل (۲-۲) : الف) نیمرسانائی با گاف انرژی مستقیم، ب) نیمرسانائی با گاف انرژی غیر مستقیم.

از نیمرساناهای با گاف نواری مستقیم می توان GaAs , GaN , CdS و InSb و از نیمرساناهای با گاف نواری غیر مستقیم می توان Si و Ge را نام برد. از آنجا که در موادی با گاف نواری غیر مستقیم اصل پایستگی تکانه ایجاب می کند که گذار از بیشینه نوار ظرفیت به کمینه نوار رسانش به کمک یک فونون انجام شود و حضور چنین فونونی به سهولت امکان پذیر نیست بنابراین گسیل نور در موادی با گاف انرژی غیرمستقیم کمتر بوقوع پیوسته و قطعات مربوطه در مقایسه با قطعاتی که از موادی با گاف انرژی مستقیم ساخته شده اند دارای بازدهی کمتری هستند. جدول (۲-۱) تعدادی از نیمرساناهای مرکب را همراه با نوع گاف نواری آنها (مستقیم و یا غیر مستقیم) نمایش می دهد.

جدول (۱-۲): گروهی از نیمرساناهای مرکب. حرف (d) معرف مستقیم بودن و حرف (i) معرف غیر مستقیم بودن گاف نواری ماده می باشد. [۲۳].

تک عنصری	ترکیبهای IV-IV	ترکیبهای III-V	ترکیبهای II-VI	ترکیبهای IV-VI
Si (i)	SiC	GaN (d)	ZnS (d)	PbS
Ga (i)	SiGe	AlN (d)	ZnSe (d)	PbTe
		InN (d)	ZnTe (d)	
		AlAs (i)	CdS (d)	
		AlGaN (d)	CdSe	

۳-۲ ناراستیهای شبکه ای

ناراستیهای شبکه ای می توانند از نوع ناراستیهای نقطه ای همانند تپی جاها یا از نوع غیر نقطه ای همانند در رفتگیها باشند. وجود این ناراستیها می تواند سبب از بین رفتن نظم بلوری و نیز تشکیل حالتی جایگزیده در ماده شود. در صورتی که چگالی ناراستیهای شبکه در ماده بلورین زیاد باشد این امکان فراهم می شود که آنها در نقش مراکز دهنده یا پذیرنده عمل کرده و بر چگالی حاملهای بار تاثیر بگذارند. این مراکز هم چنین می توانند بعنوان مراکز پراکندگی حاملها سبب کاهش تحرک آنها شده یا در نقش مراکز بازترکیبهای غیرتابشی به کاهش راندمان اپتیکی ماده منجر شوند.

۴-۲ ناخالصیها

به منظور کنترل میزان رسانندگی مواد نیمرسانا از اتمهای ناخالصی استفاده می شود. ناخالصیها در هنگام رشد یا بعد از فرایند رشد به درون ماده وارد می شوند. ناخالصیها نیز مانند ناراستیهای شبکه ای می توانند حالتی مقید انرژی را در گاف نواری ایجاد کنند. بسته به اینکه ترازهای ایجاد شده در نزدیکی لبه نوارهای رسانش یا ظرفیت یا در نواحی وسط گاف نواری باشند بترتیب به ناخالصیهای کم عمق یا عمیق موسومند. لازم به ذکر است که ناخالصیهای کم عمق سبب افزایش رسانندگی ماده

می شوند در حالی که ناخالصیهائی عمیق در نقش مراکز تله ای عمل کرده به فرایند بازترکیب حاملها کمک می کنند.

۵-۲ مواد آلیاژی

بر اساس قانون وگارد گاف انرژی نیمرساناهای آلیاژی تابعی از کسر مولی عناصر سازنده آلیاژ می باشد برای مثال در ترکیب سه تائی $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ گاف نواری آن عبارت است از:

$$\text{Eg}(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = x \text{Eg}(\text{InN}) + (1-x) \text{Eg}(\text{GaN}) - bx(1-x) \quad (1-2)$$

در این رابطه $0 \leq x \leq 1$ است. جمله سوم در این عبارت سبب انحنا (خمش) گاف انرژی می شود و بهمین دلیل ضریب این جمله، b به پارامتر خمش موسوم است. لازم به ذکر است که نه تنها اندازه گاف انرژی بلکه مستقیم یا غیر مستقیم گاف نواری ماده آلیاژی نیز به کسر مولی عناصر سازنده وابسته است [۲۴].

۶-۲ ساختار بلوری نیمرساناهای نیتروژندار

نیمرساناهای نیتروژندار در حالت کپه ای (شامل InN , GaN , AlN و InN) دارای ساختارهای ورتسایت^۱ (WZ)، زینک بلند^۲ (ZB) و سنگ نمک^۳ هستند. ساختار WZ نسبت به دو ساختار دیگر برای نیمرساناهای نیتروژندار از نظر ترمودینامیکی ساختاری پایدارتر می باشد.

از آنجا که اغلب لایه های مورد بررسی ما در مقالات دارای ساختارهای ورتسایت و مکعبی هستند، در ادامه به معرفی جزئیات این ساختارها می پردازیم.

ساختار WZ دارای دو ثابت شبکه بنامهای a , c است. این ساختار متشکل از دو شبکه

ششگوشی تنگ پکیده (^۴hcp) است که به اندازه $\frac{3}{8}c$ در هم فرو رفته اند. ساختار ZB همانند ساختار

الماسی از درهمروی دو شبکه ^۵fcc تشکیل شده که به اندازه یک چهارم قطر اصلی در هم فرو رفته

¹ Wurtzites

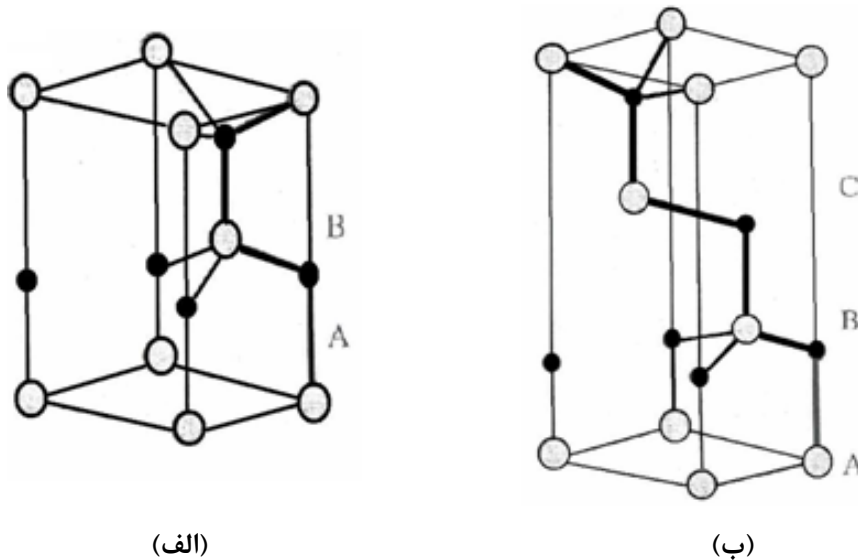
² Zinblende

³ Rocksolt

⁴ Hexagonal close-packed

⁵ Face center cubic

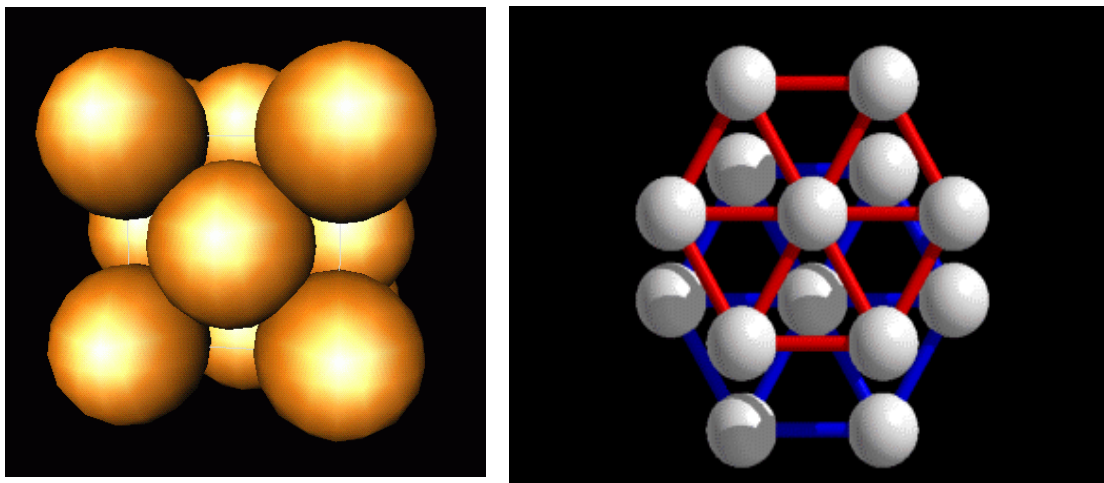
اند. شکل (۳-۲) نحوه قرار گرفتن اتمها در ساختارهای ورتسایت (WZ) و ساختار (ZB) نشان می دهد [۲۶ و ۲۵].



شکل (۳-۲): نحوه قرار گرفتن اتمها در ساختار الف) ورتسایت و ب) زینک بلند [۲۵].

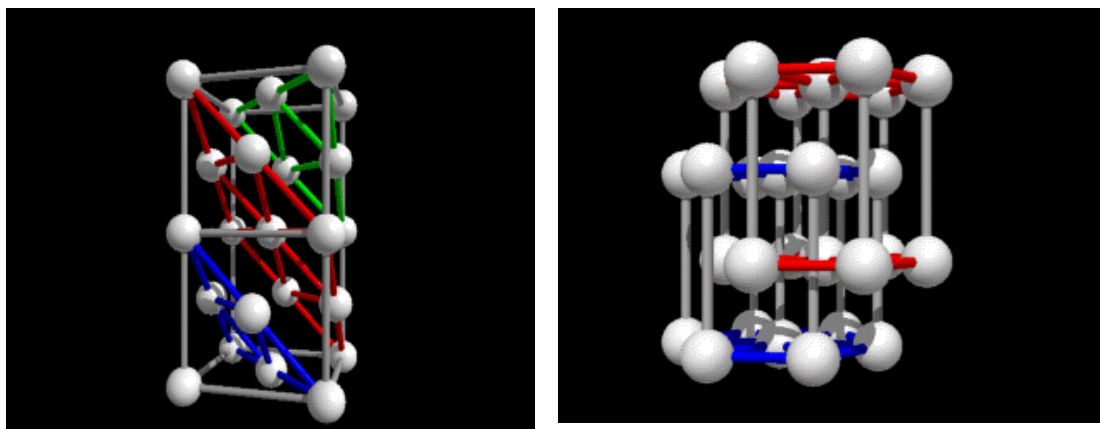
همانطور که مشاهده می شود ساختارهای WZ و ZB شباهت زیادی به یکدیگر دارند. از جمله در هر دو ساختار اتمهای گروه سوم با چهار اتم نیتروژن احاطه می شوند و یا بالعکس هر اتم نیتروژن با چهار اتم از گروه سوم احاطه شده است. تفاوت بین دو ساختار را بیش از هر چیز در ساختار تنگ پکیده و نیز در چینش صفحات اتمی می توان مشاهده کرد.

در ساختار تنگ پکیده WZ (شکل ۲-۴) هر اتم صفحه بالائی در محل فرو رفتگی بین سه اتم صفحه زیرین قرار دارد در حالی که در ساختار تنگ پکیده ZB هر اتم صفحه بالائی در محل فرو رفتگی بین چهار اتم صفحه زیرین قرار دارد.



شکل (۲-۴): نحوه قرار گرفتن اتمها در ساختار تنگ پکیده WZ (سمت راست) و ساختار تنگ پکیده ZB (چپ).

در ساختار hcp چینش صفحات پکیده در راستای بلوری (0001) به صورت ABAB... است. در حالی که در ساختار fcc چینش صفحات پکیده در راستای بلوری (111) به صورت ABCABC... است. این چینشها در (شکل ۲-۵) نشان داده شده اند.



شکل (۲-۵): نحوه چینش صفحات در ساختار تنگ پکیده WZ (سمت راست) و ساختار تنگ پکیده ZB (چپ).

جدول (۲-۲) برخی مشخصات وابسته به نیمرساناهای نیتروژندار GaN, AlN و InN را در ساختارهای WZ و ZB بدست می دهد.

جدول (۲-۲): برخی از ویژگیهای نیمرساناهای نیتروژندار GaN, AlN و InN شامل گاف نواری (در دماهای

پایین و دمای اتاق)، ثابتهای شبکه و ثابت دی الکتریکی در ساختارهای WZ و ZB [۲۷ و ۲۴].

ترکیب نیتروژندار		GaN	AlN	InN
نوع ساختار				
WZ	گاف انرژی	Eg(4K)= 3.505 eV Eg(300K)=3.4 eV	Eg(5K)= 6.28 eV Eg(300K)= 6.2 eV	Eg = 0.7-1.9 eV
	ثابت شبکه (۳۰۰k)	a = 3.189 Å c = 5.185 Å	a = 3.112 Å c = 4.982 Å	a = 3.48 Å c = 5.790 Å
	ثابت دی الکتریک	$\epsilon_r = 10$	$\epsilon_r = 8.5$	$\epsilon_r = 15.3$
ZB	گاف انرژی در ۳۰۰k	Eg= 3.2-3.3 eV	Eg= 5.11 eV	Eg= 2.2 eV
	ثابت شبکه (۳۰۰k)	a = 4.52 Å	a = 4.38 Å	a = 4.98 Å

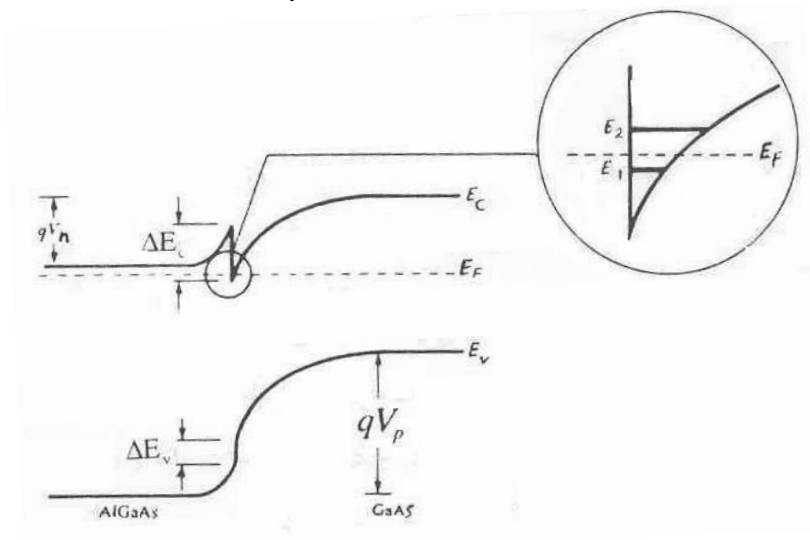
ساختار بلوری این مواد تا حد زیادی وابسته به ساختار بلوری زیرلایه است به طوری که در صورت استفاده از SiC و یا Al_2O_3 (موسوم به Sapphire) به عنوان زیرلایه، لایه رشد یافته دارای ساختار ورتسایت خواهد بود و چنانچه زیرلایه ای با ساختار مکعبی مانند MgO, Si و GaAs استفاده شود لایه رشد یافته ساختار مکعبی خواهد داشت [۲۷ و ۲۸].

۲-۷ ساختارهای با چاه کوانتومی در نیمرساناهای نیتروژندار

در طی دو دهه اخیر با توجه به پیشرفتهای صورت گرفته در روشهای رشد لایه های بلوری تحقیقات زیادی بمنظور ارتقاء کیفیت و کارائی قطعات نیمرسانا انجام شده است. بخش عمده ای از این تحقیقات، شامل تحقیقاتی است که در زمینه ساختارهای با ابعاد پایین (چاههای کوانتومی-سیمهای کوانتومی و نقاط کوانتومی که در زمره ساختارهای ناهمگون بشمار می آیند) صورت گرفته است. مهمترین مشخصه این ساختارهای نانومتری این است که توابع موج الکترونها و حفره ها در داخل

ماده محبوس می شوند که به اثر محدودیت کوانتومی^۱ موسوم است. در این حالت به دام افتادن توابع موج الکترون و حفره، سبب افزایش همپوشانی آنها (نسبت به حالت کپه ای) و نتیجتاً تسریع در بازترکیب الکترون و حفره می شود، بهمین خاطر راندمان نوری در قطعات اپتوالکترونیکی مبتنی بر نانوساختارهای نیمرسانا بطور چشمگیری افزایش می یابد.

اساس ساختارهای وابسته به چاههای کوانتومی برگرفته از چینش لایه ها در ساختارهای ناهمگون است. در این ساختارها از دو ماده نیمرسانا با گاف های انرژی متفاوت استفاده می شود به طوری که مرز مشترک آنها حتی الامکان عاری از ناراستیهای بلوری باشد. در این ساختارها تمایل به همترازی سطح فرمی در لایه های مجاور، سبب جابجائی حاملها در بین لایه ها و نتیجتاً ایجاد یک میدان الکتریکی داخلی در این لایه ها می شود. بر اثر ایجاد میدان الکتریکی داخلی نوارهای انرژی خمیده می شوند (شکل ۲-۶) و در صورتی که یکی از لایه ها با ناخالصی آلیایش یافته باشد حاملهایش (مثلاً الکترونها) تمایل پیدا می کنند تا در نزدیکی فصل مشترک لایه ها در یک چاه کوانتومی باریک با ترازهای انرژی گسسته در نوار رسانش نمونه آلیایش نیافته محدود شوند. در این شرایط الکترونها که از چگالی و تحرک الکتریکی بالائی برخوردارند یک گاز الکترونی دو بعدی^۲ (2DEG) را تشکیل می دهند که در عملگری قطعات الکترونیکی مثل ترانزیستورهای اثر میدانی بسیار موثر است.



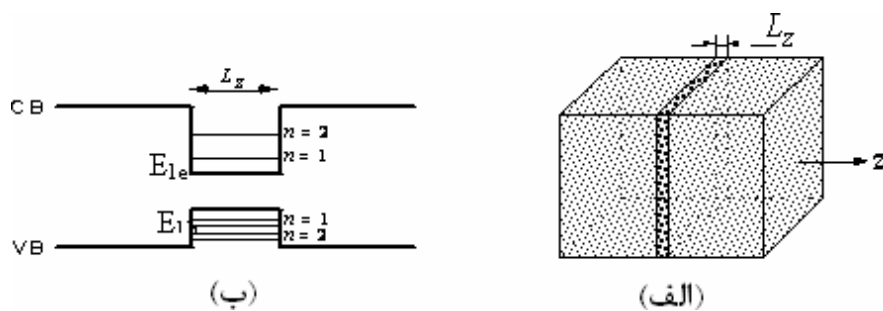
شکل (۲)-

(۶): نحوه تشکیل گاز الکترونی دوبعدی در یک ساختار ناهمگون [۲۵].

¹ Quantum Confinement Effect

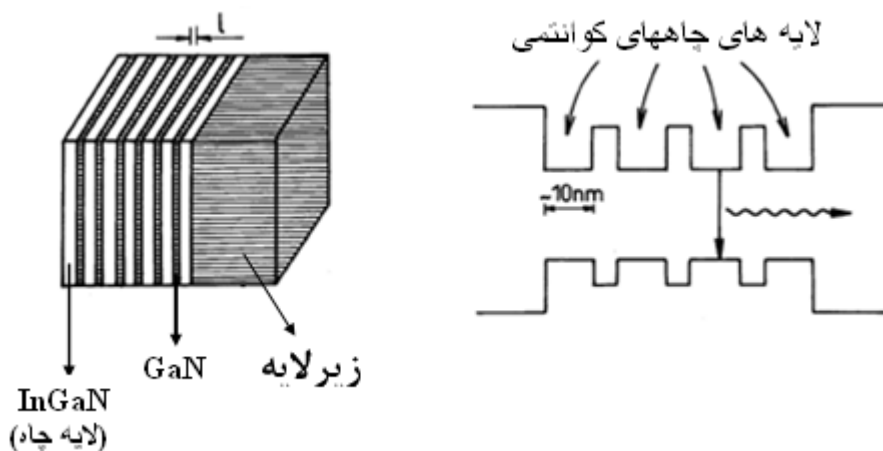
² Two Dimensional Electron Gass

با ابداع روشهای پیشرفته ای همچون روش MBE¹ و یا MOCVD² تهیه ساختارهای ناهمگون با لایه های تک بلوری فوق نازک (به ضخامت چند لایه اتمی) با کیفیت عالی امکان پذیر شد که امر مهمی برای تولید ساختارهای چاه کوانتومی بشمار می آید. شکل (۲-۷) چیدمانی از لایه های سازنده یک چاه کوانتومی را نشان می دهد. در این ساختار، چاه کوانتومی از یک لایه نازک نیمرسانا (مانند InGaN) که بین دو لایه با گاف نواری بزرگتر (مانند GaN) قرار گرفته بوجود می آید و وقتی که لایه چاه بقدر کافی نازک بشود کوانتس ترازهای انرژی در نوار ظرفیت و رسانش را در پی خواهد داشت..



شکل (۲-۷): (الف) تصویر لایه ها در یک ساختار ناهمگون یک چاه کوانتومی، (ب) ترازهای کوانتیده انرژی در چاه.

در صورت تکرار این چینش چند لایه ای، ساختار متناوبی از GaN/InGaN بوجود می آید که به یک ساختار چاه کوانتومی چندگانه (MQW)³ منجر می شود (شکل ۲-۸).



¹ Molecular Beam Epitaxy
² Metal Organic Chemical Vapour Deposition
³ Multiple Quantum Well

شکل (۲-۸): تصویری از لایه نشانی و ساختار نواری یک چاه کوانتومی چندگانه.

۲-۸ خواص نوری ساختارهای کوانتومی نیمرساناهای نیتروژندار

چنانچه می دانیم الکترونهاى زیادى در نوار ظرفیت نیمرساناها حضور دارند. این حاملها می توانند با کسب انرژی از یک عامل خارجی به نوار رسانش صعود کرده و حفره‌ایی در نوار ظرفیت به جای گذارند. بعد از تولید زوجهای الکترون-حفره در یک ماده الکترونهاى برانگیخته شده در نوار رسانش تمایل دارند به وضعیت تعادلى خود در نوار ظرفیت برگردند و با حفره ها ترکیب شوند. در اینصورت انرژی حاصل از بازترکیب الکترون و حفره امکان تابش نور از ماده را به وجود می آورد. تابش نور از یک نیمرسانا لومینسانس^۱ نامیده می شود که برحسب عامل برانگیختگی به شاخه های زیر تقسیم می شوند:

برانگیختگی الکترونها و تولید زوج الکترون - حفره می تواند بر اثر تحریک نیمرسانا توسط نور (معمولا یک نور لیزر) انجام پذیرد. در این حالت تابش حاصل از بازترکیب حاملها فتولومینسانس^۲ (PL) نامیده می شود. در صورتی که برانگیختگی الکترونها بر اثر بمباران ماده با الکترونهاى پراثری حاصل شوند این فرآیند را کاتدلومینسانس^۳ (CL) می نامند. چنانچه برانگیختگی حاملها بر اثر عبور جریان الکتریکی در نمونه صورت بگیرد و سپس بازترکیب آنها منجر به تولید نور شود این فرآیند را الکترومولومینسانس^۴ (EL) نامند. سرانجام در صورتی که برانگیختگی بر اثر گرما باشد لومینسانس مربوطه را لومینسانس گرمائی^۵ (TL) گویند.

۲-۹ خواص الکتریکی ساختارهای کوانتومی نیمرساناهای نیتروژندار

وجود میدانهای الکتریکی داخلی در نیمرساناهای نیتروژندار از ویژگیهای مهم این نیمرساناها بشمار می آید. این میدانها می توانند ناشی از میدانهای پیزو الکتریک یا میدانهای خودبخودی باشند. میدانهای پیزو الکتریک در ساختارهای ناهمگون متاثر از کرنشهایی هستند که از نابرابری ثابت شبکه

^۱ Luminescence

^۲ Photoluminescence

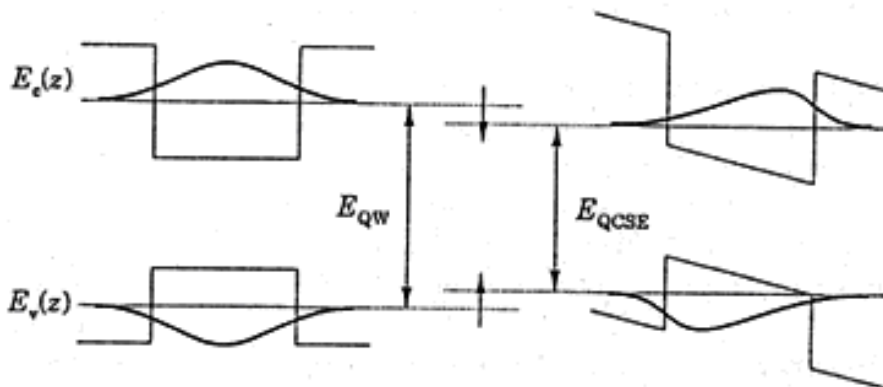
^۳ Cathode Luminescence

^۴ Electro Luminescence

^۵ Thermal Luminescence

و یا نابرابری ضرایب انبساط گرمائی لایه های مجاور بوجود می آید ولی میدان خودبخودی ناشی از تقارن ضعیف بلوری است. این میدانها سبب تاثیرات نامطلوبی همچون کاهش بازدهی اپتیکی و انتقال بسوی قرمز در طیف تابش گسیلی از نانوساختارهای مبتنی بر این نیمرساناها می گردند که به اثر حبس کوانتومی استارک (QCSE) معروف است [۲۹].

برای توصیف اثر حبس کوانتومی استارک در نیمرساناهای نیتروژنداری که بصورت نانو ساختارهای کوانتومی (به ویژه بصورت چاههای کوانتومی) مورد استفاده قرار می گیرند باید خاطر نشان نمائیم که میدانهای الکتریکی داخلی در این نیمرساناها با تغییر شکل کف چاههای پتانسیل از حالت مستطیلی شکل (۲-۹)، سبب جدائی هر چه بیشتر الکترونها و حفره ها از یکدیگر و نتیجتاً کاهش همپوشی توابع موج مربوط به آنها شده بدین ترتیب احتمال باز ترکیب تابشی بین آنها کاهش می یابد. از سوی دیگر تغییر شکل کف چاههای پتانسیل سبب فروافت ترازهای انرژی در چاههای کوانتومی (کاهش گاف انرژی موثر آنها) شده که انتقال بسوی قرمز در طیف تابش گسیلی آنها را در پی خواهد داشت.



شکل (۲-۹): اثر حبس کوانتومی استارک در یک چاه کوانتومی: کاهش انرژی ترازهای انرژی و همچنین انتقال تابع توزیع احتمال حضور حاملها به طرف دیواره های چاه بخوبی قابل مشاهده است [۳۰].

تاثیرات نامطلوب اثر حبس کوانتومی استارک سبب شده است تا محققان درصدد یافتن روشهایی برای کاهش آن برآیند. یکی از نتایج برجسته این تحقیقات دستیابی به سازوکارهای منحصر بفرد برای رشد

نوع جدیدی از ساختارهای MQW، تحت عنوان ساختارهای نیمه قطبی و غیر قطبی برای نیمرساناهای نیتروژندار گردیده است [۱۶ و ۱۵] که در (بخش ۲-۱-۱) به آن پرداخته ایم. در توصیف میدانهای الکتریکی داخلی در این ساختارها به دو مورد مهم شامل الف) میدانهای پیزوالکتریکی و ب) میدانهای خود بخودی اشاره خواهیم کرد.

الف) میدان پیزوالکتریک: این میدانها از قطبش پیزوالکتریک که در اثر کرنش در سطح مشترک ساختارهای ناهمگون وجود دارد به وجود می آید [۳۰ و ۳۱]. این کرنش به دو عامل مربوط می شود:

۱) نابرابری ثابت شبکه دو لایه مجاور

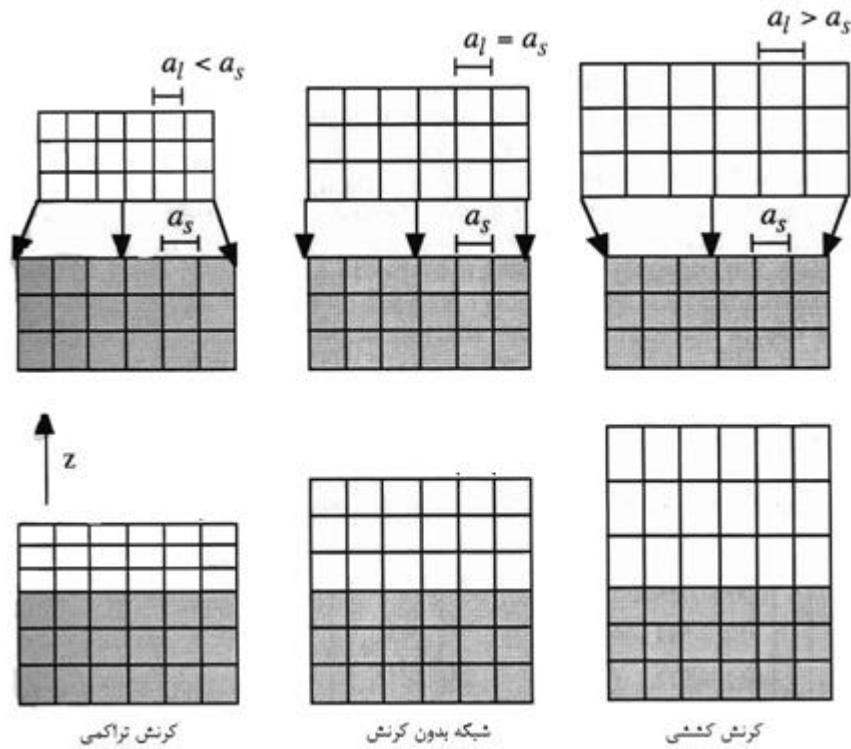
۲) اختلاف در ضرایب انبساط گرمایی دو لایه

این عوامل باعث به وجود آمدن بارهای قطبشی در سطح مشترک دو لایه شده و به یک میدان الکتریکی موسوم به میدان پیزوالکتریکی منجر می شوند. در ادامه به منظور توصیف این میدانها در نیمرساناهای نیتروژندار به اختصار به معرفی فرایند کرنش در ساختارهای ناهمگون می پردازیم.

یکی از نکات مهم در رشد نیمرساناهای نیتروژندار عدم انطباق ثابت شبکه و نیز تفاوت ضریب انبساط گرمایی بین لایه های مجاور و یا لایه و زیرلایه است. این تفاوتها می توانند سبب ایجاد کرنش در لایه شوند. حضور کرنش در بین لایه های روآراستی شده می تواند بر خصوصیات فیزیکی چاههای کوانتومی و ساختارهای ناهمگون نیز موثر باشد. در صورتی که ضخامت لایه رشد داده شده بر روی زیرلایه از یک ضخامت بحرانی کمتر باشد این امکان وجود دارد که از لحاظ ترمودینامیکی لایه ها پایدارتر بوده و عدم انطباق با یک تغییر شکل کشسان همراه باشد [۳۲ و ۳۳]. در ضخامت های بیشتر از ضخامت بحرانی با ایجاد دررفتگی، کرنش تا حدی یا تماماً از بین رفته و آزاد می شود. شکل (۲-۱۰) تغییر شکل کشسان لایه ها را که می تواند سبب کرنش تراکمی^۱ یا کرنش کششی^۲ در صفحه رشد شود نشان می دهد.

^۱ Compressive Strain

^۲ Tensile Strain



شکل (۲-۱۰): طرح شماتیکی از تغییر شکل کشسان لایه ها در صفحه رشد که ناشی از عدم انطباق ثابتهای شبکه ای قبل و بعد از اتصال لایه و زیرلایه است. a_s معرف ثابت شبکه زیرلایه و a_l معرف ثابت شبکه لایه است [۳۳].

در این تصویر a_s معرف ثابت شبکه زیرلایه و a_l معرف ثابت شبکه لایه می باشد.

به طور کمی کرنش در صفحه رشد به صورت:

$$\varepsilon_{||} = \frac{a_s - a_l}{a_l} \quad (۱-۲)$$

تعریف می شود. با توجه به این رابطه هرگاه ثابت شبکه لایه (a_l) از ثابت شبکه زیرلایه (a_s) کوچکتر باشد کرنش از نوع تراکمی بوده و مقداری مثبت خواهد شد و چنانچه ثابت شبکه لایه از ثابت شبکه زیرلایه بزرگتر باشد کرنش حاصل از نوع کششی و مقدار آن منفی می شود.

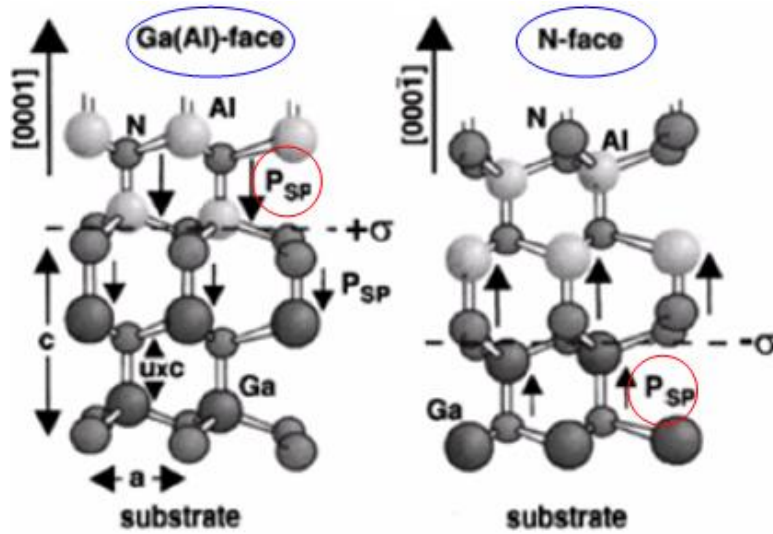
اگر چه معمولاً در راستای قائم عاملی برای اعمال نیرو وجود ندارد لکن از آنجا که لایه متراکم شده یا کشیده شده تمایل دارد حجم خود را با منقبض یا منبسط کردن ثابت شبکه ای (a_{\perp}) که عمود بر جهت تغییر شکل است ثابت نگه دارد لذا مشاهده می شود که در این راستا ثابت شبکه لایه دستخوش تغییرات می شود. بنابراین کرنش در صفحه معمولاً یک کرنش عمودی را بدنبال خواهد

داشت. در این حالت نسبت بین کرنش در صفحه، ϵ_{11} و کرنش عمودی، ϵ_{\perp} که نسبت پواسون نامیده می شود با رابطه زیر داده می شود [۳۴]:

$$v = -\frac{\epsilon_{\perp}}{\epsilon_{11}} \quad (۲-۲)$$

ب) قطبش خودبخودی: این قطبش عمدتاً در ساختارهای ورتسایت وجود دارد. در بلورها یا لایه هایی که ساختار ورتسایت دارند به علت تقارن ضعیف بلوری، مراکز بارهای مثبت و منفی بر روی یکدیگر قرار نداشته در نتیجه بلور به طور خود به خودی قطبیده است. این قطبیدگی سبب به وجود آمدن یک میدان الکتریکی در داخل بلور می شود. وجود این قطبش به این معنی است که حتی در ساختارهای ناهمگونی که لایه و زیرلایه کاملاً از نظر ثابت شبکه ای با هم انطباق دارند همچنان این میدان الکتریکی در این ساختارها وجود خواهد داشت. این قطبش برخلاف قطبش پیزوالکتریکی دارای جهت ثابتی در بلور می باشد که در ساختارهای ورتسایت همان امتداد رشد بلور یعنی امتداد [0001] است. نکته مهم دیگر این است که قطبش با قطبیدگی^۱ بلور مرتبط است. یعنی چنانچه با حرکت در امتداد محور رشد، پیوندها از کاتیون به سمت آنیون باشد یا از آنیون به سمت کاتیون جهت قطبش فرق خواهد کرد. در ترکیبات نیتروژن دار GaN وقتی که پیوندها در امتداد محور رشد از اتم کاتیون (Ga) به سمت اتم آنیون (N) باشد، به این نوع قطبیدگی، قطبیدگی گالیم (Ga) و در صورتی که پیوندها در این امتداد از اتم آنیون (N) به سمت اتم کاتیون (Ga) باشد، به این قطبیدگی، قطبیدگی نیتروژن (N) می گویند. در حالت اول سطح لایه یعنی بالاترین صفحه بلوری موازی با صفحه (۰۰۰۱) با اتمهای Ga پوشیده خواهد شد که نمونه را اصطلاحاً Ga-face گویند و در حالت دوم سطح لایه با اتمهای N پوشیده می شود که نمونه را N-face گویند. در حالت اول جهت میدان قطبش خودبخودی (PSP) مخالف جهت رشد است ولی در حالت دوم موافق جهت رشد می باشد شکل (۲-۱۱).

^۱ Polarity



شکل (۲-۱۱): نمودار شماتیک ساختارهای بلوری Ga-face و N-face. در حالت Ga-face بالاترین صفحه بلوری موازی با صفحه (۰۰۰۱) با اتمهای Ga پوشیده شده و در حالت N-face با اتمهای N پوشیده شده است.

مشاهدات آمباچر و همکارانش [۳۵] حاکی از آن بود که وقتی یک لایه واسط از جنس GaN بر روی زیرلایه Sapphire با روش رشد MOCVD رشد داده شد سطح بالایی لایه به اتمهای Ga ختم گردید در حالی که اگر این لایه نشانی به روش MBE انجام گردد نمونه بصورت N-face در می آید.

فصل سوم

رشد و مشخصه یابی نمونه

مقدمه

در این فصل راجع به فرایند رشد و مشخصه یابی نمونه مورد مطالعه خود صحبت خواهیم کرد. این نمونه که بروش MOCVD بر روی زیر لایه sapphire رشد یافته شامل لایه ای از گالیم نیتراید نوع n (با آلایش سیلیکونی) است که بر روی لایه واسط گالیم نیتراید غیر آلئیده لایه نشانی شده است. رشد نمونه و مشخصه یابی آن در دانشگاه صنعتی دارمشتات آلمان انجام شده است. از آنجا که این نمونه و نمونه های مشابه ساختار پایه بسیاری از قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی مبتنی بر نیمرساناهای نیتروژندار را تشکیل میدهد لذا سعی نمودیم در باره تنش و کرنش بعنوان یکی از عوامل محدود کننده کارایی قطعات مبتنی بر این ساختار تحقیق نمائیم.

پس از لایه نشانی نمونه های آزمایشگاهی آگاهی از کیفیت رشد، میزان خلوص و ویژگیهای بلوری لایه ها از اهمیت ویژه ای برخوردار است بنابر این از تکنیکهای مختلف شامل طیف سنجی پراش پرتو X (XRD)، طیف سنجی فوتوالکترونیهای پرتو X (XPS)، تصویربرداری با میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) و طیف سنجی رامان برای مشخصه یابی آنها بهره گرفتیم.

در ادامه به معرفی روش MOCVD (روش رشد بکار رفته برای رشد نمونه) و روشهای مختلف مشخصه یابی نمونه مورد مطالعه خواهیم پرداخت. در هر قسمت پس از آنکه باختصار اصول نظری تکنیک بکار گرفته شده را بیان نمودیم راجع به روش تجربی و سیستم دستگای آن تکنیک و بعضی از داده های بدست آمده و موارد استفاده از آنها مطالبی را بیان خواهیم نمود.

۳-۱ رشد نمونه به روش رسوب گذاری بخار شیمیایی (MOCVD)

برای استفاده از مواد نیمرسانای بلورین لازم است که آنها با کیفیت بلوری بهتر و تا حد امکان خالصتر تهیه شوند. البته در برخی موارد لازم است نیمرسانای مورد نظر با عناصر دیگری آلایش یابند تا بدینوسیله برخی خواص شیمیایی یا فیزیکی (مانند رسانندگی الکتریکی آن) تغییر یابند. از نظر کاربردی در صنعت استفاده از نیمرساناهای با کیفیت بالاتر و حتی المقدور با ابعاد بزرگتر مطلوبتر

است. لازم به ذکر است که نوع سیستم رشد دهنده و شرایط رشد در آن سیستم از مهمترین عوامل موثر بر کیفیت نیمرساناهای تولید شده است و تغییر شرایط و پارامترهای سیستم رشد دهنده تاثیر زیادی بر کیفیت محصول دارند. به همین لحاظ توام با تغییر شرایط رشد لازم است که بطور مکرر با انجام آزمایشهای ویژه ای کیفیت محصول تعیین شود تا شرایط بهینه رشد برای نمونه مورد نظر مشخص شود.

یکی از مهمترین و متداولترین روشهای رشد بلور، رشد یک لایه نازک بر روی زیرلایه ای از یک بلور همسان است که می تواند از جنس همان لایه رشد داده شده و یا از جنس ماده ای دیگر ولی با ساختمان بلوری مشابه باشد. نشانیدن لایه تک بلوری جهتدار روی زیرلایه به رشد روآراستی^۱ موسوم است که معمولا رشد در فاز گازی مواد صورت می گیرد. بطور کلی لایه نشانی در فازهای مختلف جامد، مایع و گاز امکانپذیر است. اما از آنجا که در فاز گازی کنترل فرایند رشد لایه ها از طریق کنترل جریان گاز ساده تر است لذا این روش ترجیح داده می شود و بهمین خاطر روآراستی شیمیائی در فاز بخار^۲ روش مناسبی برای رشد نیمرساناها می باشد [۳۶].

روش MOCVD نیز که یکی از روشهای روآراستی در فاز بخار است که بطور گسترده در فرآوری نیمرساناها خصوصا برای تهیه لایه های نازک تک بلوری مورد استفاده قرار می گیرد. در این روش لایه مورد نظر بصورت رسوب بر روی زیرلایه ای که می تواند از همان جنس یا جنس دیگری باشد رشد می یابد. امروزه در اغلب قطعات جدید از رشد لایه های نازک بر روی بلورهای کپه ای استفاده می شود. ضخامت این لایه های نازک غالبا در حدود نانومتر است. در صورتی که علاقه مند به داشتن لایه ای عاری از هرگونه کشش و تنش از سوی زیرلایه باشیم، باید زیر لایه بگونه ای انتخاب شود که از لحاظ ثابت شبکه با لایه نازک فوقانی حداکثر هماهنگی را داشته باشد. در این شرایط در صورتی که هر دو لایه هم جنس باشند رشد آنها را روآراستی همگون^۳ گویند (مانند رشد لایه نازک

^۱ Epitaxy

^۲ Chemical Vapor Deposition

^۳ Homo-Epitaxy

Si روی سیلیکون کپه ای) و اگر از موادی با جنس متفاوت باشند رشد آنها را روآراستی ناهمگون^۱ گویند مانند رشد لایه GaN بر روی زیرلایه Al_2O_3 .

۳-۱-۱ زیر لایه

زیرلایه به عنوان نگهدارنده لایه نازک عمل می کند، این لایه در کاربردهای الکترونیکی معمولاً نقش عایق را دارد و در کاربردهای اپتوالکترونیکی مثل قطعات نور گسیل باید شفافیت خوبی داشته باشد. در همه موارد نیاز به پایداری طولانی مدت قطعه ایجاب می کند تغییرات دمائی و رطوبتی محیط، تابشهای الکترومغناطیسی و واکنشهای شیمیائی (در حین رشد و بعد از آن) قادر به تغییر خواص آن نباشند. هم چنین لازم است در خلال تغییرات نسبتاً زیاد دمائی چسبندگی زیرلایه به لایه فوقانی حفظ شود. این تغییرات دمائی ممکن است در مرحله آماده سازی دستگاه (گاز زدائی در دماهای بالا)، در زمان روشنایی (روی زیر لایه سرد یا گرم) و یا در زمان بازپخت پیش آیند. همچنین زیرلایه باید مقاومت مکانیکی، مقاومت الکتریکی، رسانندگی گرمائی و جلاپذیری مناسبی هم داشته باشد و میل ترکیبی آن با مواد دیگر (از جمله گازهای موجود در محفظه و مواد تشکیل دهنده لایه های فوقانی) خیلی کم باشد.

اگر چه یافتن ماده ای که همه این ویژگیها را در حد مطلوبی داشته باشد امکان پذیر نیست ولی با اینحال استفاده از موادی همچون سیلیسیوم، ژرمانیوم، سیلیکون کارباید و Sapphire و بعضی از هالیدهای قلیائی به عنوان زیرلایه در قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی مبتنی بر نیمرساناهای نیتروژندار بخاطر آنکه تا حدود زیادی از ویژگیهای مورد نظر بهره مند می باشند و بهای مناسبی نیز دارند بهترین راه حل است.

Sapphire پرکاربردترین و متداولترین زیرلایه مورد استفاده برای رشد تری نیترایدهاست [۳۷].

عمده ترین ویژگی این ماده این است که ویفرهای بلوری بزرگ و با کیفیت بالای آن با قیمت کم و به

^۱ Hetro-Epitaxy

آسانی در دسترس می باشند. Sapphire یک بلور شفاف در نور مرئی و پایدار در دماهای بالا است و فن آوری رشد آن به مراتب بالائی ارتقا یافته است. یکی از مزیت‌های Sapphire بعنوان زیرلایه برای رشد تری نیترایدها نظیر GaN این است که جهت گیری بلوری هر دو در راستای رشد [۰۰۰۱] یکسان است. نکته دیگری که در استفاده از Sapphire باید در نظر داشته باشیم این است که ثابت‌های شبکه Sapphire در دمای اتاق برابر با: $a=4/7592$, $c=12/9915$ آنگستروم است که در مقایسه با ثابت‌های شبکه ای GaN ($a=3/189 A^\circ$ و $c=5/18 A^\circ$) از اختلاف زیادی برخوردار است [۳۸]. این ناهماهنگی در ثابت‌های شبکه می تواند سبب بروز دررفتگی، تنش و کرنش در لایه های GaN شود. در فصل‌های بعدی در مورد این تنشها، کرنشها و آثار پیزوالکتریکی وابسته به آنها بحث خواهیم کرد.

۳-۱-۲ رشد به روش MOCVD

در روش MOCVD دو نوع واکنش شیمیائی امکان وقوع دارند. یک نوع از این واکنشها، واکنش تجزیه است که اغلب در دماهای بالا رخ می دهد و در بعضی موارد با تابش نور فرابنفش و یا فرسرخ همراه است. در این مورد می توان به واکنش تجزیه ترکیبات گازی GeH_4 و یا SiH_4 اشاره کرد که از آنها برای تهیه Ge یا Si خالص استفاده می شود. نوع دوم واکنشها به واکنشهای انتقالی معروفند. در این دسته از واکنشها هر یک از عناصر تشکیل دهنده نیمرسانای مورد نظر از یک ترکیب خاص جدا شده، سپس در طی یک فرایند شیمیائی دیگر با یکدیگر ترکیب می شوند تا نیمرسانای ترکیبی مورد نظر بر روی زیرلایه تشکیل گردد. این نوع از واکنشها معمولا برای تولید نیمرساناهای ترکیبی مانند نیمرساناهای III-V بکار می آیند. این روش برای رشد لایه های نازک نیز بسیار مناسب می باشد و بهمین خاطر بطور گسترده در ساخت قطعاتی نظیر سلولهای خورشیدی، حسگرها، دیودهای معمولی و لیزری مورد استفاده قرار می گیرد.

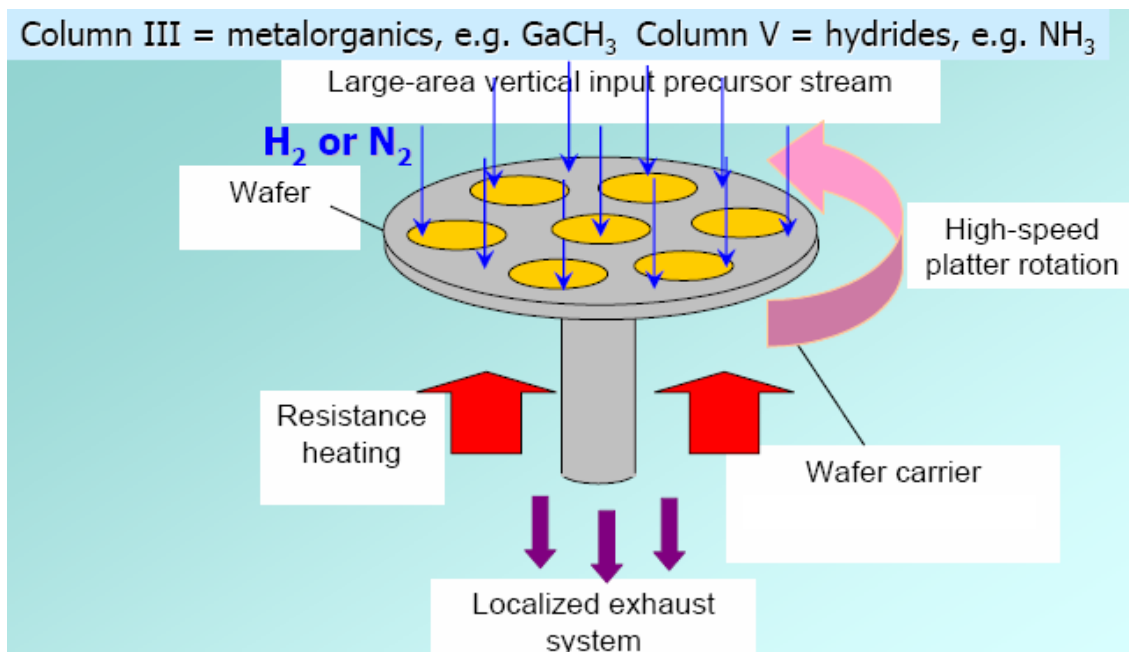
در این روش که برای ساخت نیمرساناهای ترکیبی III-V به کار گرفته می شود هیدراتهای گروه سوم جدول تناوبی با ترکیبات فلزات آلی و در برخی موارد الکیلهای گروه سوم (مانند تری متیل گالیم₃Ga(CH₃) یا تری متیل ایندیم₃In(C₂H₅)) به همراه هیدراتهای گروه پنجم (مانند AsH₃ یا NH₃) در فشار پایین و دمای بالا واکنش انجام می دهند. فشار پایین و دمای نسبتاً بالا سبب می شود که تغییر مخلوط گازها به سادگی صورت گرفته، رشد چند لایه نازک را به روی یکدیگر امکان پذیر سازد. این روش که در فشار پایین انجام می شود بنام¹ Lp-MOCVD نیز مرسوم است [۳۹]. این واکنشها در داخل لوله ای از جنس کوارتز که بر روی یک پایه نگهدارنده کربنی قرار دارد انجام می شوند. بطور کلی فرایند رشد را می توان در دو مرحله زیر خلاصه کرد:

الف) مولکولهای گازی شامل الکیل ها و هیدراتها از داخل لایه مرزی به سطح بلور پایه نفوذ کرده، در سطح مجاور ویفر که دمای آن حدود ۷۰۰ درجه و فشار آن ۰/۱ تا ۰/۵ اتمسفر می باشد تجزیه شده و بدین ترتیب عناصر گروه سوم و پنجم که به آنها عناصر پایه ای نیز گفته می شود تولید می شوند.

ب) عناصر پایه ای در سطح داغ حرکت کرده تا در مکان مناسبی بر روی بلور قرار گیرند، در این زمان رشد صورت می گیرد.

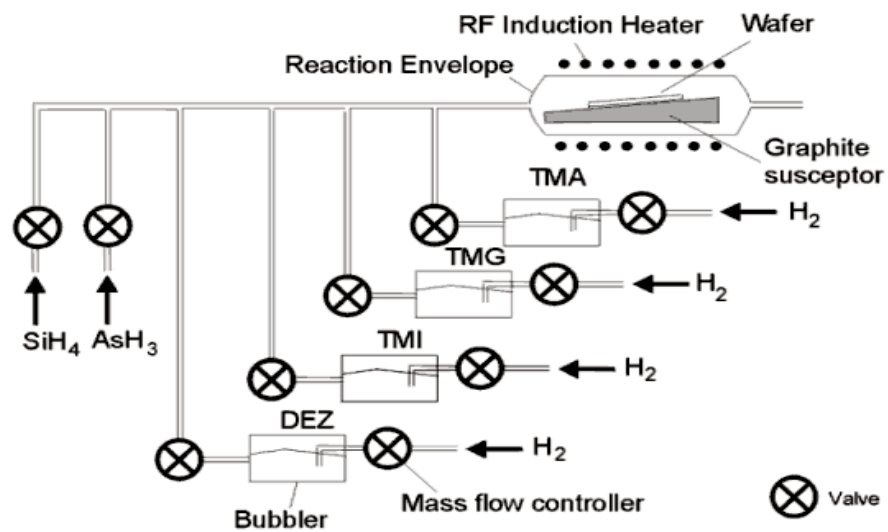
در هریک از مراحل ذکر شده می توان میزان رشد را بوسیله مقدار مواد ورودی کنترل کرد. شکل (۱-۳) طرحی از قسمت داخلی راکتور در یک سیستم رشد MOCVD را نشان می دهد. مطابق شکل ویفر زیرلایه بر روی یک لایه گرافیتی در داخل محفظه واکنش قرار دارد که توسط یک گرم کننده القایی RF تا دمائی که به نوع ترکیب مورد نظر بستگی دارد گرم می شود. در این روش گازها شامل عناصر مورد نیاز در فرایند لایه نشانی هستند و واکنش شیمیایی نیز بین این گازها و زیرلایه درون راکتور انجام می گردد [۴۰].

¹ Low pressure Metal Organic Chemical Vapor Deposition



شکل (۳-۱): طرحی ساده از بخش داخلی محفظه سیستم رشد MOCVD که رسوب گذاری مواد واکنشگر را بر روی ویفر در حال چرخش نشان می دهد. [۴۰].

در سیستم رشد MOCVD با تنظیم شار پیش ماده های گازی می توان سرعت لایه نشانی را کنترل کرد. در این سیستم معمولا از گاز هیدروژن به عنوان گاز حامل استفاده می شود. شکل های (۲-۳) الف و ب بترتیب طرحی ساده از سیستم لوله های انتقال گاز و نیز ساختمان کلی یک دستگاه رشد MOCVD را نشان می دهند.



(الف)



(ب)

شکل (۲-۳): (الف) طرح شماتیک (ب) تصویر حقیقی سیستم رشد برآرستی MOCVD

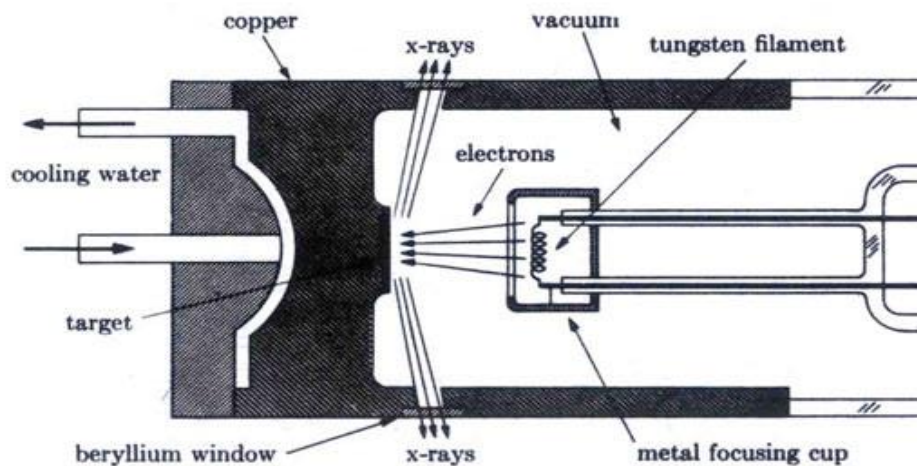
یکی از قسمت‌های مهم سیستم رشد MOCVD سیستم تبخیر شیمیائی است که معمولاً در محیط خلا فعالیت می نماید و اصولاً باید دارای شرایط زیر باشد:

- ۱- فشار محفظه در آستانه رشد بقدر کافی پایین باشد.
 - ۲- کاهش فشار محفظه (از فشار جو به فشار آستانه) در مدت زمان قابل قبولی صورت گیرد.
 - ۳- امکان حذف مواد آلاینده از درون محفظه وجود داشته باشد.
 - ۴- امکان دسترسی آسان به محفظه رشد وجود داشته باشد.
- در این سیستمها برای تامین سه شرط اول از پمپهای خلا با سرعت پمپاژ کافی و نیز حتی الامکان کوتاهترین و قطورترین لوله های اتصال بین پمپ و محفظه استفاده می شود. متداولترین پمپهایی که برای این منظور بکار می روند پمپهای پخشی روغنی هستند که با روغن معدنی سیلیکون به عنوان شاره عامل کار می کنند و معمولا توسط پمپهای مکانیکی چرخشی تخلیه مقدماتی می شوند.

۲-۳ طیف سنجی پراش پرتو X (XRD)^۱

۱-۲-۳ تولید و کاربرد پرتو X

منبع تولید پرتو X، یک لامپ تحت خلاء است که جریانی در حد میلی آمپر برای گرم کردن رشته تنگستن درون آن به کار می‌رود. با گرم شدن رشته تنگستن الکترونها از آن گسیل می‌شوند. در این دستگاه با بیشتر شدن جریان الکتریکی گرماده تعداد الکترونها گسیل شده از رشته تنگستن نیز افزایش می‌یابد. در این دستگاه از یک ولتاژ بالا در حدود ۱۵ تا ۶۰ کیلوولت (ولت) برای شتاب دادن به الکترونها در درون لامپ استفاده می‌شود. در اثر ولتاژ اعمال شده الکترونها با سرعت به هدف (آند)، که معمولاً از جنس یک فلز خالص است، برخورد می‌کنند. برخورد آنها به هدف سبب تولید پرتوهای X می‌گردد، که نهایتاً از پنجره‌های نازک بریلیمی (Be) لامپ خارج می‌شوند. از آنجا که برخورد الکترونها به آند سبب داغ شدن آن می‌شود، برای خنک کردن آن از جریان آب خنک (حدود ۲۰ °C) استفاده می‌شود. در شکل (۳-۳) طرحی ساده از منبع تولید پرتوهای X دیده می‌شود.



شکل (۳-۳): طرح شماتیک یک منبع تولید پرتوهای X و اجزا مختلف آن.

^۱ X Ray Diffraction

پرتوهای X دارای سه ویژگی کاربردی مهم هستند که عبارتند از :

۱- میزان جذب پرتوهای X در مواد گوناگون به چگالی آنها وابسته است، رادیوگرافی اشعه X بر همین مبنا استوار است و از این روش برای تهیه تصویر از ساختارهای گوناگون مواد استفاده می‌شود که در پزشکی، صنعت و امور تحقیقاتی زمینه‌های کاربردی فراوانی دارد.

۲- براساس طیف نگاری تشعشعات ثانویه یا باریکه‌های الکترونی گسیل شده از موادی که توسط پرتوهای X پراورزی برانگیخته شده اند اسپکترومتری فلئورسانس پرتوهای X ابداع گردید. این روش برای اندازه‌گیری مقدار عناصر موجود در مواد گوناگون کاربرد پیدا کرده است. یک از تکنیکهائی که بر این پایه بنا شده تکنیک XPS است که در بخش (۳-۳) راجع به آن صحبت خواهیم کرد.

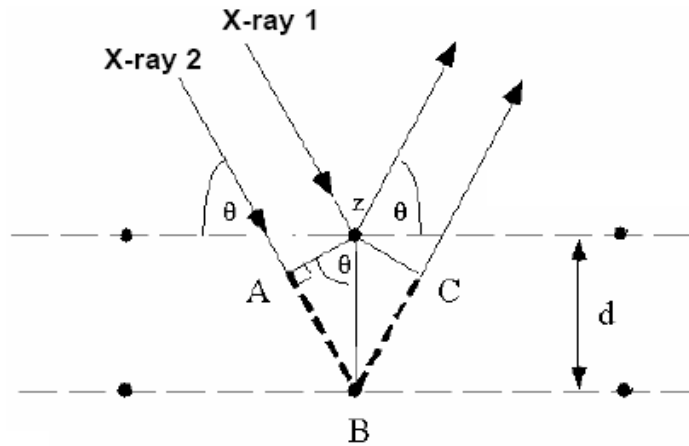
۳- بر پایه ماهیت موجی پرتوهای X، بلور شناسی پرتو X با استفاده از تکنیکهائی مثل طیف سنجی بازتابی پرتو X و طیف سنجی پراش پرتو X (XRD) ابداع شدند. این تکنیکها و مخصوصا XRD اطلاعات منحصر بفردی درباره ساختار مواد بلورین ارائه می‌دهند که موضوع بحث ما در این قسمت می باشد.

۲-۲-۳ طیف سنجی پراش پرتو X (XRD)

وقتی طول موج تابش الکترو مغناطیسی با اندازه ثابت شبکه یک بلور قابل مقایسه باشد در اثر برهم کنش چنین تابشی با بلور پدیده پراش قابل مشاهده خواهد بود. از آنجائی که ثابت شبکه بلورها در محدوده ۰/۱۵ تا ۰/۴۰ نانومتر قرار دارد، این محدوده متناظر با ناحیه ای از طیف الکترومغناطیسی است که پرتوهای X با انرژی ۳ تا ۸ کیلو الکترون ولت واقع اند. بنابر این با تابش چنین پرتوهائی به بلور و بازتاب آنها از صفحات مختلف بلوری پدیده‌های تداخل سازنده و ویرانگر قابل مشاهده خواهد بود که طیف سنجی پراش پرتو X برای مطالعه بلورها مبتنی بر همین پدیده است [۴۱].

بر اساس قانون براگ برای پرتوهای بازتابیده از صفحات بلوری بشرط آنکه اختلاف راه آنها مضربی صحیح از طول موج پرتو فرودی باشد تداخل سازنده خواهد بود و در صورتی که اختلاف راه

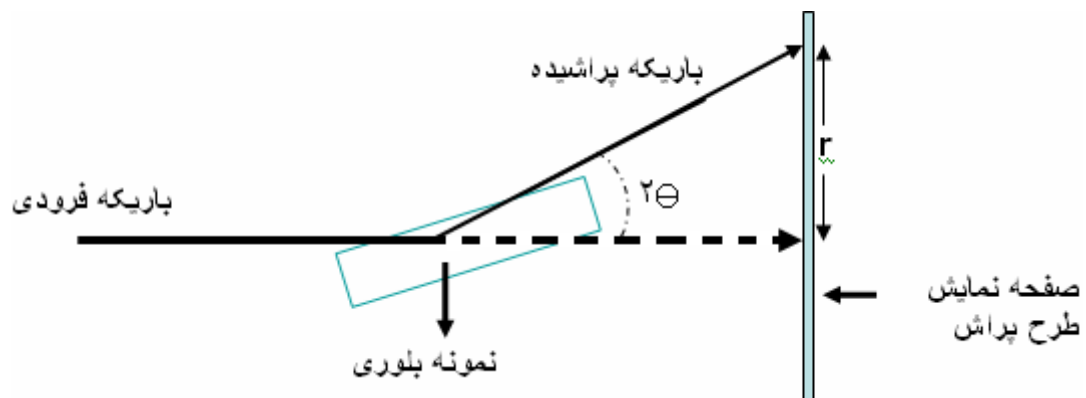
آنها مضرب فردی از نصف طول موج باشد تداخل ویرانگر خواهد بود. در شکل (۳-۴) این وضعیت را در مورد دو دسته پرتو که از دو صفحه بلوری موازی و متوالی بازتاب یافته اند نشان می دهد.



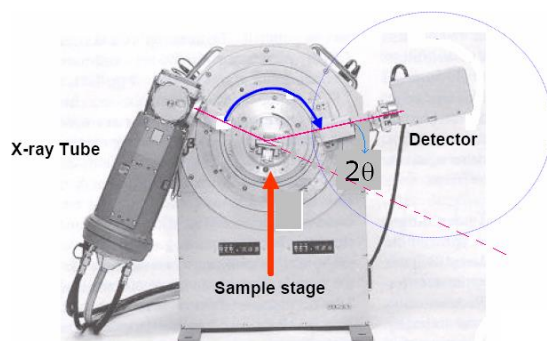
شکل (۳-۴): بازتاب براگ از صفحات بلوری و تداخل سازنده پرتوهای بازتابیده.

شرط تداخل سازنده پرتوهای ۱ و ۲ این است که $AB + BC = n\lambda$ اما از آنجائی که $BC=AB$ و $AB = 2d \sin \theta$ پس داریم: $n\lambda = 2d \sin \theta$.

بدیهی است وقتی زاویه بین پرتو فرودی با یک خانواده از صفحات بلوری θ باشد، زاویه بین پرتو فرودی و پرتو بازتابیده (که آشکار ساز نیز در همان راستاست) برابر 2θ خواهد بود. با توجه به این موضوع، این نوع طیف نگاری را رویش (اسکن) $2\theta - \theta$ می گویند. شکل (۳-۶) طرح ساده و تصویر حقیقی دستگاه پراش پرتو X را نشان می دهد.

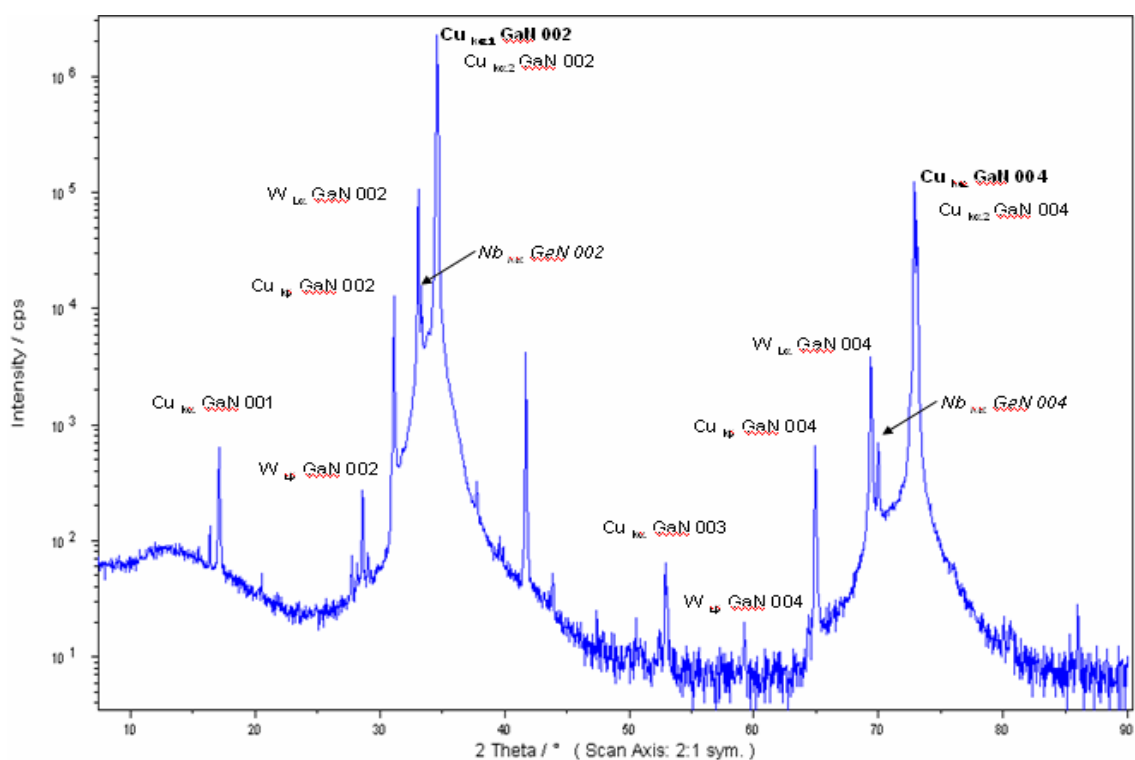


شکل (۳-۵): طرحی ساده از پراش پرتو X در اسکن $2\theta - \theta$



شکل (۳-۶): تصاویری از دستگاههای طیف سنج پراش پرتو X که در دانشگاه صنعتی دارمشتات آلمان برای مشخصه یابی نمونه مورد مطالعه از آن استفاده شد.

بنابر آنچه که گفته شد انتظار داریم که در طیف سنجی پراش اشعه X از یک نمونه بلوری همانند نمونه مورد آزمایش ما بعد از اسکن $2\theta - \theta$ طیفی از نمونه بدست آید که قله های آن متناظر با بازتاب براگ از صفحات بلوری مختلف میباشند. در شکل زیر طیف پراش اشعه X (اسکن $2\theta - \theta$) مربوط به یکی از نمونه های مورد مطالعه که لایه ای تک بلوری از جنس گالیم نیتراید می باشد (فصل ۴) دیده میشود. در این طیف دو قله طیفی مربوط صفحات بلوری (۰۰۰۲)، (۰۰۰۴) بخوبی مشهودند. در این طیف نگاری از سه نوع هدفهای فلزی W, Nb, Cu برای تولید پرتو X استفاده شده است. نکته قابل توجه آنکه تغییر جسم هدف نه تنها سبب تغییر موقعیت قله های مذکور می شود بلکه سبب تغییر شدت قله ها نیز شده است به گونه ای که وقتی از هدفهای فلزی W, Nb برای تولید پرتو X استفاده شده شدت قله های طیفی مربوط به صفحه بلوری (۰۰۰۱) به قدری کاهش یافته که این قله ها قابل رویت نیستند. قله مربوط به این صفحه بلوری در زاویه حدودا ۱۷ درجه برای هدف مسی بخوبی قابل مشاهده است. این موضوع نشان می دهد که در طیف سنجی پراش پرتو X برای نمونه GaN استفاده از هدف مسی بهتر است.



شکل (۳-۷): طیف XRD نمونه مورد مطالعه. محور افقی نمایشگر زاویه 2θ و محور قائم شدت پرتوهای پراشیده را نشان می دهد.

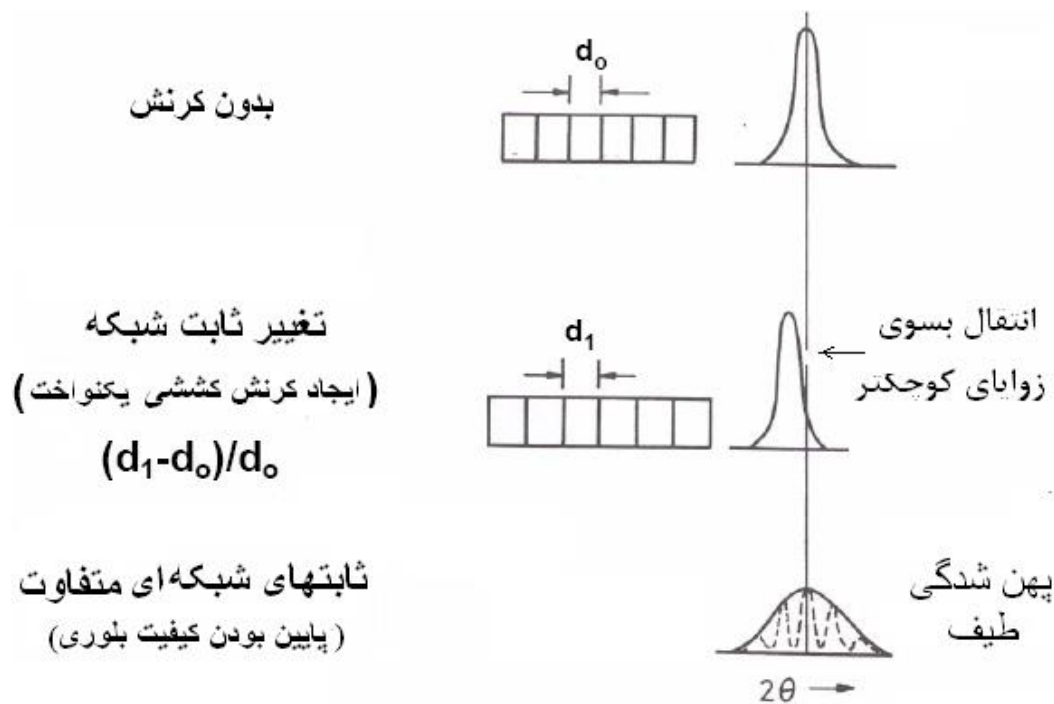
ضمناً نرم افزار مربوطه علاوه بر طیف XRD اطلاعات دقیقتری از این طیف نگاری، شامل موقعیت هر قله (که هر یک مربوط به بازتاب براگ از یک صفحه بلوری خاص است) و نیز زاویه 2θ متناظر را به ما خواهد داد.

در هنگام مطالعه طیف پرتو X پراشیده از یک ماده موقعیت قله ها، پهن شدگی و نیز شدت آنها پارامترهای مهمی هستند که به شناخت نمونه مورد نظر کمک می کنند. در این مطالعات برای شناخت نمونه و تعیین پارامترهای ساختاری آن لازم است طیف XRD آن با طیف مرجع موادی که احتمالاً در نمونه حضور دارند مقایسه شوند. معمولاً طیف مرجع مواد در نرم افزار جانبی وجود دارد. این نرم افزار حاوی اطلاعاتی است که توسط یک مرکز بین المللی بنام ICDD¹ تهیه و گردآوری

¹ International Center for Diffraction Data

شده است. در این نرم افزار که سیستم طیف نگار مورد استفاده ما نیز از آن بهره می برد طیف XRD بیش از ۵۰ هزار نمونه از مواد آلی و غیر آلی ثبت شده است.

نکته ای که در کاربردهای طیف سنجی پراش پرتو X برای لایه های نازک باید مورد توجه قرار بگیرد این است که بخاطر وجود تنش و کرنش در این لایه ها ثابتهای شبکه و بنابراین فاصله بین صفحات بلوری در این لایه ها نسبت به حالت کپه ای تغییر خواهد کرد. بنابر این طبق قانون براگ انتظار می رود که موقعیت قله ها در طیف پراش پرتو X بسته به اینکه کرنش از نوع ترکمی باشد یا کششی بترتیب به سمت طول موجهای بزرگتر و یا کوچکتر (شکل ۳-۸) انتقال یابد.

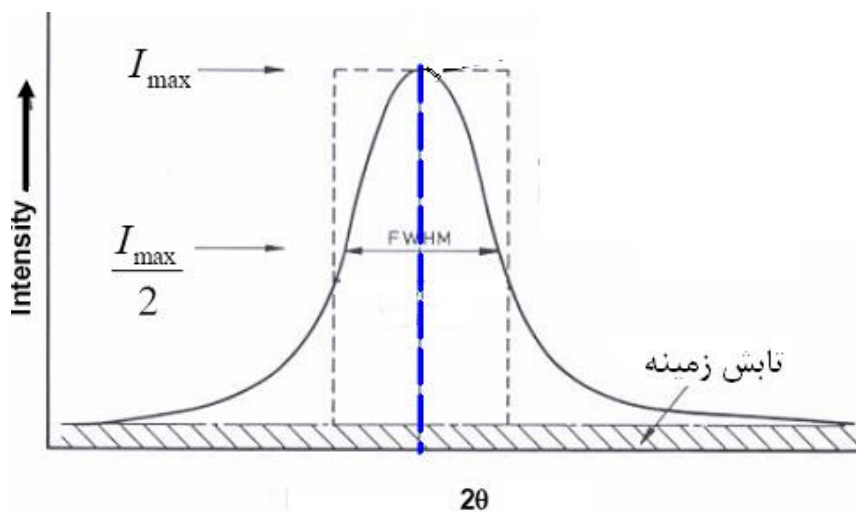


شکل (۳-۸): طرح پراش سه شبکه بلوری، نمونه با کیفیت مطلوب (بدون کرنش)، دارای کرنش کششی یکنواخت (شکل میانی) و نمونه با کیفیت پایین (شکل پایینی) که دارای طیف پهن می باشد.

در بلورهای با کیفیت بالا که دارای نظم بلوری خوب و ثابت شبکه ای یکنواخت در قسمت‌های مختلف بلورند، قله طیف پرتو ایکس تیز می باشد. بالعکس وقتی کیفیت بلور پایین باشد مخصوصاً وقتی که اجزا یا لایه های مختلف بلور از یکنواختی ثابت شبکه برخوردار نباشند طیف پرتو ایکس پراشیده از

نمونه دارای پهن شدگی خواهد بود. بنابر این میزان پهن شدگی در نصف شدت قله ها^۱ (FWHM) می تواند در تعیین کیفیت نمونه مورد نظر به ما کمک نماید.

از نظر محاسباتی برای تعیین کمیت مذکور ابتدا باید اثرات زمینه از نمودار قله مورد نظر حذف شود سپس نمودار طیف باقیمانده با منحنی توابع متعارف (مثل تابع گاوسی یا لورنتزی) برازش گردد. آنگاه در بهترین برازش ممکن (با مشخص شدن پارامترهای برازش) می توان میزان پهن شدگی در نصف شدت قله ها را با دقت و سهولت تعیین نمود.



شکل (۳-۹): نمایشی از یک قله در طیف پراش X که کمیت FWHM از نظر بزرگی و موقعیت مکانی در آن نشان داده شده است.

ما در بررسی کیفیت نمونه مورد مطالعه خود پهن شدگی در نصف شدت قله ها را مد نظر قرار دادیم. در داده های تجربی مربوطه (بخش ۴-۳-۲) پهن شدگی اندک در نصف شدت قله ها (FWHM) نشان می دهند که این نمونه از کیفیت نسبتاً خوبی برخوردار است.

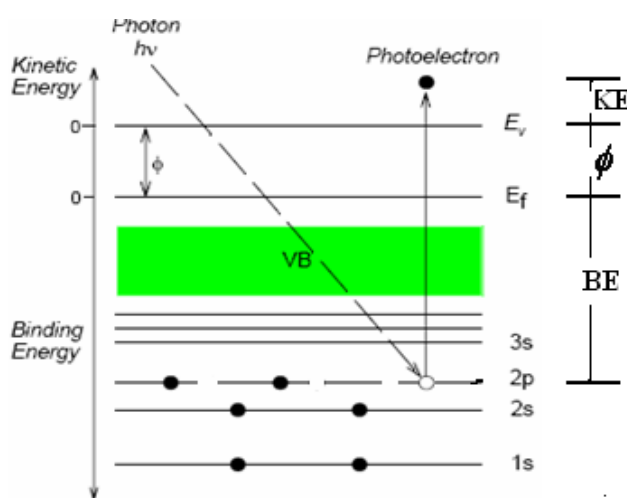
^۱ Full Width at Half Maximum

۳-۳ طیف سنجی فوتوالکترونی پرتو X (XPS)^۱

طیف سنجی فوتوالکترونی پرتو X (XPS) بعنوان یکی از روشهای آنالیز شیمیائی مواد برای بررسی ترکیب شیمیایی سطح (تا حدود پنج لایه اتمی) به کار برده می شود. امکان تعیین حالت‌های شیمیایی مربوطه از توانائیهای دیگری این تکنیک است. این موارد سبب شدند که اغلب آزمایشگاههای تجزیه و شناسائی مواد از آن بهره ببرند [۴۲].

۳-۳-۱ اصول نظری XPS

تکنیک XPS از لحاظ نظری مبتنی بر پدیده فوتوالکتریک است. این تکنیک با تابش تکفام پرتو X به یک نمونه و سپس آنالیز الکترونی خارج شده از آن اجرا می شود. در این طیف نگاری بسته به نوع هدف مورد استفاده در تولید پرتو X (که معمولا از جنس منیزیم یا آلومینیم است) پرتوهای X تولید شده حاصل گذار اتمی (Mg ka با انرژی $1253/6$ eV) یا (Al ka با انرژی $1486/6$ eV) می باشند. حداکثر قدرت نفوذ فوتونهای اینگونه پرتوها در مواد جامد در حدود 100 نانومتر است و در واقع این پرتوها با اتمهای ناحیه سطحی برهم کنش نموده آنگاه پدیده فوتوالکتریک (شکل ۳-۱۰) سبب گسیل الکترونها از اتمهای سطح جامد می شود.



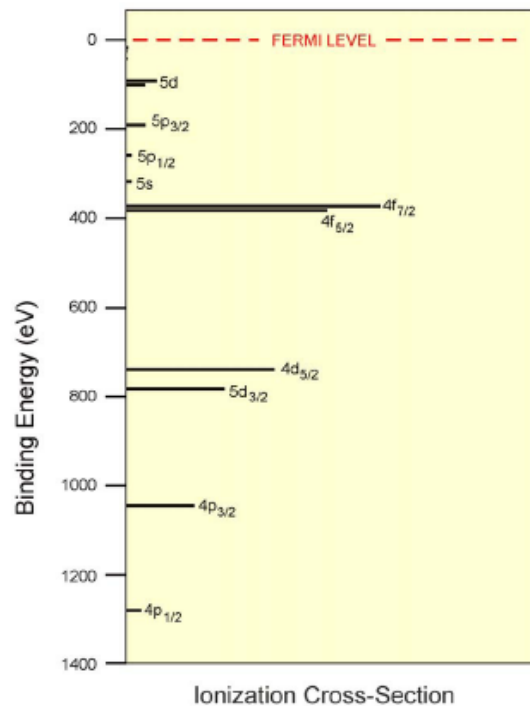
شکل (۳-۱۰): طرحی از پدیده فوتوالکتریک در اتم گالیم

^۱ X-ray Photoelectron Spectroscopy

انرژی بستگی (BE) الکترونی که در این فرایند از اتمهای خود جدا شده اند از رابطه :

$$BE = h\nu - KE - \Phi \quad (1-3)$$

بدست می آید. در این رابطه $h\nu$ انرژی فوتون های پرتو X ، KE انرژی جنبشی الکترونی گسیل شده، Φ تابع کار (حد فاصل انرژی فرمی E_f تا تراز انرژی E_v) برای ماده جامد تحت بررسی و BE انرژی بستگی الکترونی موجود در هر تراز اتمی (حد فاصل انرژی تراز مورد نظر تا انرژی فرمی آن اتم) است. مقدار Φ در هر ماده جامد مقداری معین و از خصوصیات انحصاری آن ماده می باشد. بنابر این با معلوم بودن انرژی فوتونهای پرتو X به کار گرفته شده و تعیین انرژی جنبشی (KE) فوتوالکترونیهای خارج شده از نمونه می توان برای الکترونیهای مختلف که از ترازهای درونی متفاوتی خارج شده اند مقادیر انرژی بستگی الکترونیها (BE) آنها را بدست آورد. اطلاع از این مقادیر و مقایسه آنها با داده های مرجع مربوط به مواد گوناگون به ما کمک خواهد کرد که از عناصر موجود در سطح نمونه اطلاعاتی کسب نمائیم. برای مثال شکل (۱۱-۳) به عنوان مثال انرژی بستگی، BE مربوط به ترازهای درونی را نسبت به انرژی فرمی در اورانیوم جامد نشان می دهد.

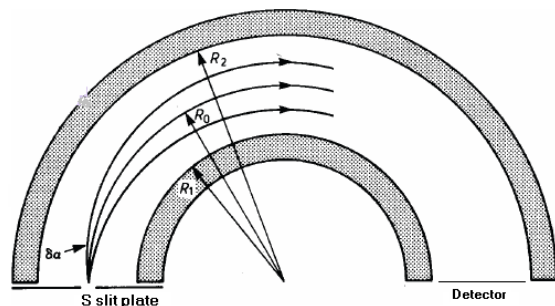


شکل (۱۱-۳): موقعیت ترازهای انرژی اتم اورانیوم نسبت به تراز فرمی آن.

۲-۳-۳ طیف نگاری به روش XPS

با توجه به معادله (۲-۳) به منظور تعیین انرژی بستگی الکترونها لازم است که در حله نخست انرژی جنبشی آنها تعیین شوند. برای رسیدن به این مقصود از یک سیستم آنالیزور الکترونی که باریکه الکترونی را بر حسب بزرگی انرژی جنبشی از هم تفکیک می کند، استفاده می شود. در این دستگاه الکترونها بسته به انرژی جنبشی شان تحت تاثیر یک میدان مغناطیسی خارجی منحرف می شوند

شکل (۱۲-۳).

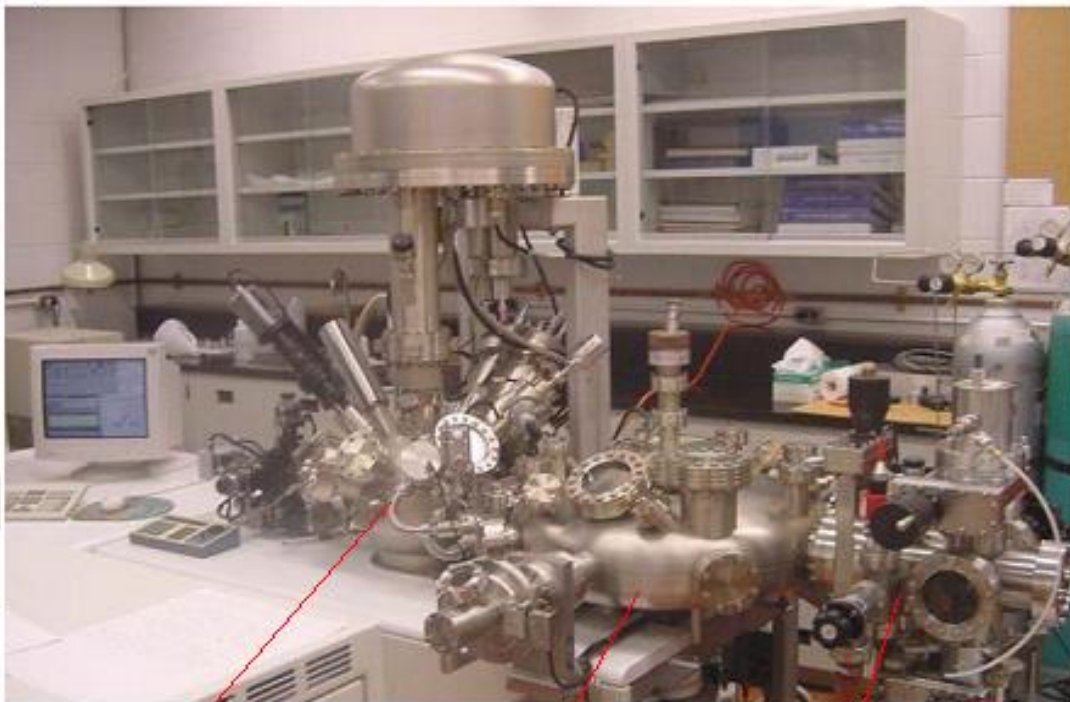


شکل (۱۲-۳): طراحی از یک آنالیزور الکترونی در سیستم XPS که الکترونها را بر حسب انرژی جنبشی آنها از

یکدیگر تفکیک می کند.

بدین ترتیب آشکارساز سیستم XPS علاوه بر تعیین انرژی بستگی الکترونها تعداد آنها را نیز در هر انرژی خاص توسط آشکارساز شمارش می کند و نموداری از تعداد الکترونها شمارش شده بر حسب انرژی بستگی آنها بدست می دهد. با انجام این آزمایش نه تنها می توان نوع عناصر تشکیل دهنده نمونه را تشخیص داد بلکه با محاسبه سطح زیر منحنی XPS مربوط به هر عنصر میتوان درصد وزنی عناصر تشکیل دهنده نمونه را نیز تعیین نمود.

از آنجائی که بطور معمول در آزمایشگاه سعی می شود نمونه ها از آلودگیهای محیطی دور باشند بنابراین باید بعد از اتمام فرایند رشد با محیط تماس پیدا نکنند. بهمین دلیل غالباً سیستمهای رشد و مشخصه یابی XPS را در یک مجموعه مرتبط با یکدیگر طراحی میکنند (شکل ۱۴-۳). در اینصورت نمونه بعد از اتمام فرایند رشد بدون آنکه به فضای آزاد راه یابد از طریق محفظه رشد به محفظه رابط مرکزی و سپس به محفظه اصلی سیستم XPS منتقل می شود.



سیستم رشد محفظه رابط مرکزی سیستم XPS

شکل (۳-۱۴): دور نمایی از سیستم رشد، محفظه رابط مرکزی و سیستم مشخصه یابی XPS

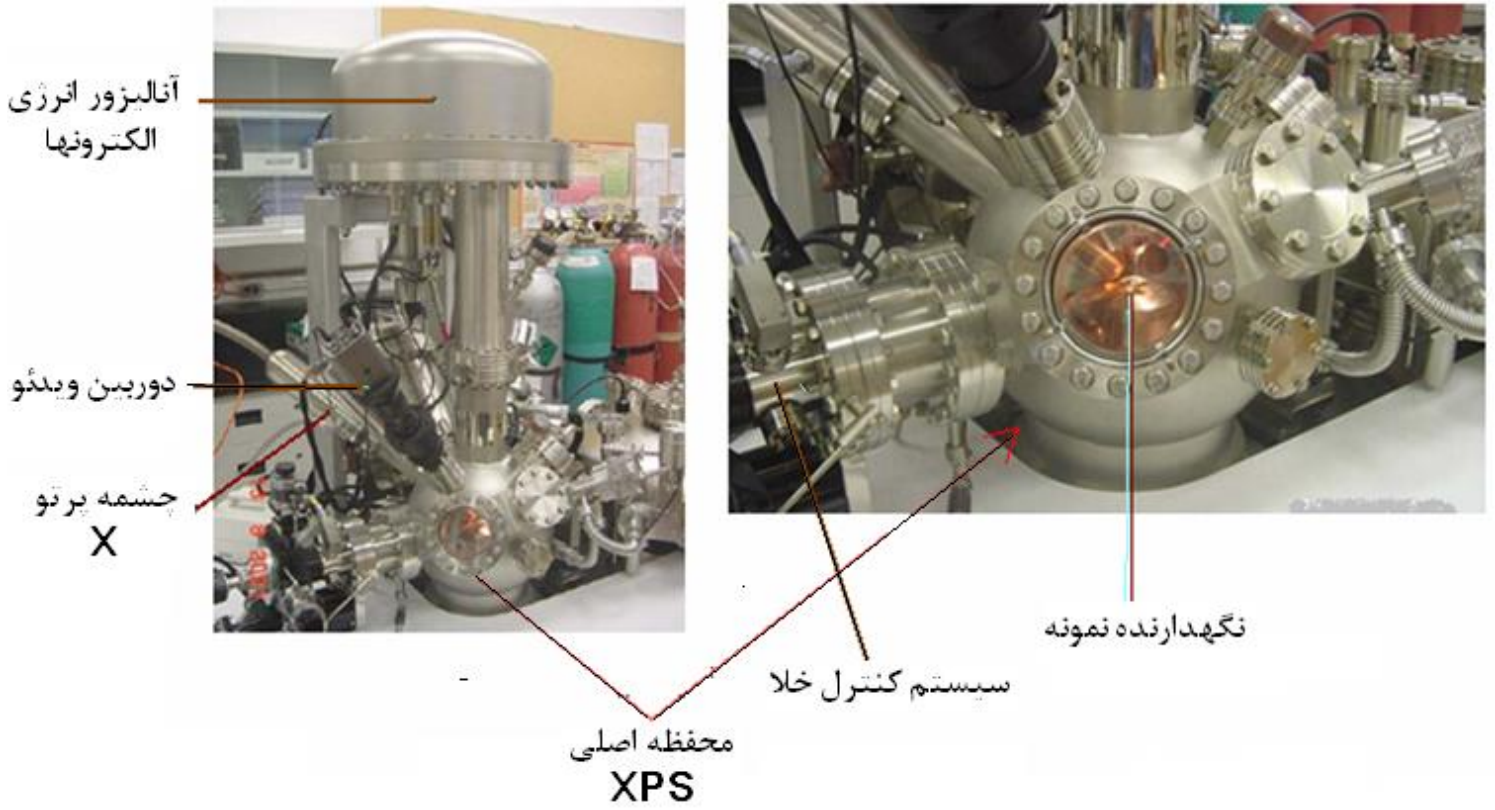
شکل (۳-۱۵) جزئیات دقیقتری از سیستم XPS را که شامل قسمتهای زیر می باشد نشان می دهد.

- چشمه پرتو ایکس
- چشمه یونهای آرگون:

یونهای آرگون پرنرژی در فرایند کندوپاش سطحی می توانند لایه نازکی را از روی سطح نمونه بردارند. برداشتن یک لایه سطحی هنگامی که احتمال آلوده بودن سطح نمونه وجود دارد ضروری است.

- سیستم تولید خلا: محیطی با درجه خلا بالا (در حد 10^{-9} Torr) علاوه بر اینکه به پاکیزه ماندن نمونه کمک می کند، از تغییر انرژی جنبشی الکترونها در اثر برخورد به ذرات محیطی نیز جلوگیری می نماید. همانطور که پیشتر ذکر شد انرژی جنبشی الکترونها کمیت مهمی در طیف نگاری XPS می باشد.

• آنالیزور انرژی الکترونیها



شکل (۳-۱۵): نمائی از سیستم مشخصه یابی XPS و بعضی از اجزا آن

۳-۴ تصویر برداری با میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM)

مقدمه

میکروسکوپهای الکترونی بر پایه خاصیت موجی بودن الکترونها شکل گرفته اند. این میکروسکوپها برای مشاهده و بررسی مواد در مقیاس بسیار ریز مورد استفاده قرار میگیرند. مهمترین دلیل پیدایش میکروسکوپهای الکترونی محدودیتهائی بود که در میکروسکوپهای نوری وجود داشت. نظر به اینکه میکروسکوپهای نوری محدود به فیزیک نور هستند بنابر این بزرگنمایی آنها بین ۵۰۰ تا ۱۰۰۰ برابر بوده، اطلاعاتی که ارائه می کنند عمدتاً از سطح اجسام است بهمین خاطر توانائی آنها در کسب اطلاعات از درون مواد مثل ساختار بلوری آنها بسیار ناچیز است. میکروسکوپهای الکترونی که در کاوش خود از یک پرتو پراثرژی الکترونی استفاده میکنند میتوانند اطلاعات بیشتری راجع به مورفولوژی، توپوگرافی یا کریستالوگرافی آن ماده ارائه نمایند [۴۳].

میکروسکوپهای الکترونی را می توان به دو دسته میکروسکوپهای روبشی و عبوری تقسیم کرد. از میکروسکوپ الکترونی روبشی، SEM^۱ برای بررسی سطوح خارجی و از میکروسکوپ الکترونی عبوری، TEM^۲ برای بررسی و شناسائی قسمتهای داخلی و ساختار بلوری مواد استفاده میشود. از آنجا که ما در بررسی نمونه خود از میکروسکوپ الکترونی روبشی، SEM استفاده کرده ایم، در ادامه بحث صرفاً در باره این میکروسکوپ صحبت خواهیم کرد.

۳-۴-۱ عملگری میکروسکوپ الکترونی روبشی:

شکل (۳-۱۶) طرح ساده ای از اجزا این میکروسکوپ را نشان می دهد. این اجزا عبارتند از:
۱- چشمه الکترونی، در این قسمت از سیستم، الکترونها تحت تاثیر فرایند گرما یونی از یک رشته

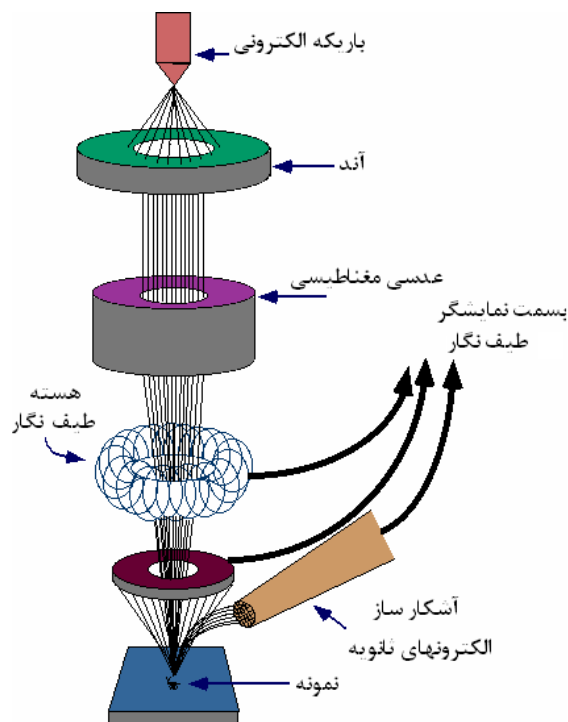
^۱ Scanning Electron Microscope

^۲ Tunneling Electron Microscope

تنگستنی خارج شده و بر اثر یک پتانسیل الکتریکی به اندازه ۱ تا ۳۰ کیلوالکترون ولت شتابدار شده یک جریان الکترونی تولید می کنند.

۲- **عدسیهای مغناطیسی**، به منظور متمرکز نمودن باریکه الکترونی، جریان الکترونی شتابدار (همانند شکل ۳-۱۵) از درون مجموعه ای از عدسیهای مغناطیسی عبور میکند تا تبدیل به یک پرتو پراثرژی و متمرکز شود. عملگری عدسیهای مغناطیسی به گونه ای است که پرتو الکترونی به هنگام برخورد با نمونه قطری در حدوداً ۱۰-۲ nm خواهد داشت.

۳- **پردازش الکترونیهای ثانوی**، فرود الکترونیهای پراثرژی بر سطح نمونه سبب شده شدن الکترونها از اتمهای سطح نمونه و خروج آنها از نمونه می شود. سیگنالهای الکتریکی وابسته به این الکترونها که به الکترونیهای ثانویه معروفند دارای اطلاعات ارزشمندی از نمونه هستند. در اثر حرکت روبشی باریکه الکترونی فرودی بر روی نمونه، سیگنالهای الکتریکی وابسته به الکترونیهای ثانویه تصویری از سطح نمونه را بر روی کامپیوتر به نمایش می گذارند.



شکل (۳-۱۶): طرحی از یک میکروسکوپ الکترونی روبشی و اجزای مختلف آن.

۳-۴-۲ روش کار با میکروسکوپ:

در مرحله نخست باید نمونه را پس از نصب بر روی پایه نگهدارنده به درون محفظه میکروسکوپ انتقال داد. در نمونه های نیمرسانا و عایق معمولاً لازم است که سطح نمونه با یک لایه نازک رسانا مانند نقره، طلا یا آلیاژهای طلا پوشش داده شود. این پوشش که بین سطح خارجی نمونه و پایه فلزی نگهدارنده اش اتصال الکتریکی برقرار می کند سبب می شود بارهای سطحی که مانع برهم کنش باریکه الکترونی و نمونه اند از سطح نمونه دور شوند و در نتیجه تصویری واضح از سطح نمونه بدست آید.

بعد از نصب نمونه و بستن درب میکروسکوپ محفظه درونی آن توسط پمپ خلا تخلیه می گردد. محیط خلا سبب میشود که باریکه الکترونی در طی مسیر انرژی خود را از دست ندهد و امکان تهیه تصویری با کیفیت مطلوب از سطح نمونه حاصل شود. سپس با به کار انداختن باریکه الکترونی و به کمک تنظیمات میکروسکوپ، باید تصویری واضح از نمونه ایجاد کرد.

۳-۵ طیف سنجی رامان در نیمرساناهای نیتروژندار

مقدمه

نظریه پراکندگی غیر کشسان نور که مبنای طیف سنجی رامان را تشکیل می دهد اولین بار در سال ۱۹۲۳ توسط یک دانشمند آلمانی بنام اسمیکل^۱ مطرح شد و پنج سال بعد دو دانشمند هندی بنامهای رامان^۲ و کریشنان^۳ توانستند آنرا بصورت تجربی مشاهده کنند که بعداً به همین خاطر به آنها جایزه نوبل اعطا گردید [۴۴].

طیف سنجی رامان که مبتنی بر فرایند پراکندگی غیرکشسان نور بوسیله مواد است به عنوان یک روش شناخته شده و در حال توسعه در تعیین خصوصیات فیزیکی و ساختار شیمیایی مواد بکار می رود. در این فرآیند فوتونها، بعنوان کوانتاهای انرژی امواج الکترو مغناطیسی با فوتونها (کوانتاهای انرژی ارتعاشی اتمهای شبکه) برهم کنش می کنند. مقایسه شدت و طول موج فوتونهای فرودی و پراکنده شده اطلاعاتی از فوتونهای شبکه و مدهای نوسانی آنها بدست می دهد که بررسی و تفسیر آنها از جنبه های متفاوتی به شناخت نمونه های مورد نظر کمک می کنند. از آنجا که فوتونها همچون الکترونها مسئول خواص حرارتی نظیر ظرفیت گرمایی، رسانائی گرمائی و انبساط گرمائی جامدات هستند بنابر این مطالعه آنها می تواند در تعیین خصوصیات گرمائی مواد از جمله شبکه بلوری آنها به ما کمک کند [۴۵].

در این فصل ما بر مبنای پراکندگی غیرکشسان نور بحث خود را بر روی خواص نوری مواد غیرفلزی که عمدتاً حاصل پاسخ یونی این مواد به نور است متمرکز کرده ایم. چون یونها با جرمی در حدود ۱۰۰۰ برابر جرم الکترونها همواره در حال حرکتهای نوسانی کوتاه برد حول موضع تعادل خود در شبکه هستند. انواع مدهای نوسانی وابسته به این ارتعاشات شبکه ای به مدهای فونونی موسوم اند در ادامه پس از معرفی فوتونهای مختلف، خواهیم دید که بعضی از این مدها مستقیماً با نور

¹ Smekal

² Raman

³ Krishnan

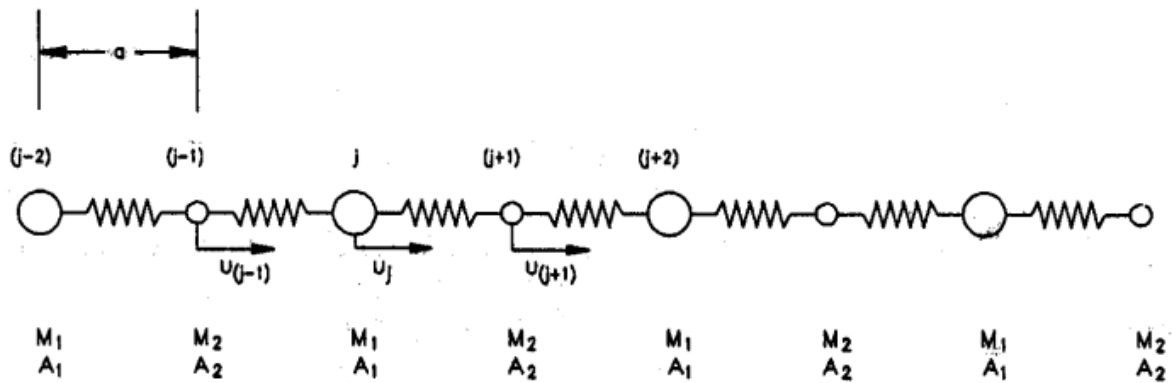
برهمکنش کرده، جذب قوی نوری یا پراکندگی آنها را از ماده سبب می شوند که این پراکندگی مبنای طیف سنجی رامان را تشکیل می دهد.

طیف سنجی رامان بعنوان یک سازوکار استاندارد می تواند برای مطالعه خصوصیات شبکه ای، و نیز بررسی خواص الکتریکی و مغناطیسی مواد جامد بکار رود. با توجه به اینکه در این سازوکار نیازی به اتصالات فلزی و آماده سازی نمونه نظیر نازک سازی و جلاسازی نیست بنابراین می تواند براحتی برای مشخصه یابی نمونه های جامد به ویژه در موادی که پیوند بین اتمهای آنها از نوع غیر یونی است بکار آید. در این دسته از مواد پراکندگی رامان قویتر از مواد دیگر است و به همین دلیل از این روش می توان برای مطالعه شبکه های بلوری نیمرساناهای نیتروژندار که دارای مخلوطی از پیوندهای یونی و کوالانسی هستند نیز استفاده کرد [۴۶ و ۴۷].

۳-۵-۱ فونونهای نوری و صوتی

الف) توصیف کلاسیکی

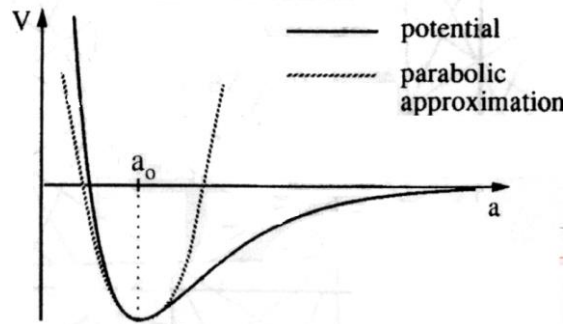
به عنوان یک مدل ساده برای توصیف فونونها، شبکه ای یک بعدی از دو اتم متفاوت را در نظر می گیریم (شکل ۳-۱۷) که هر جفت از این اتمها با جرمهای M_1 , M_2 سلول واحد را تشکیل می دهند. هم چنین فرض می کنیم که این زنجیره خطی از اتمها توسط فنرهای ایده آل بطول a که از قانون هوک پیروی می کنند به هم متصل شده اند [۴۸].



شکل (۳-۱۷): زنجیره یک بعدی متشکل از دو اتم با جرمهای M_1 و M_2 و که در موقعیتهای A_1 , A_2 به فاصله

تعادلی a از هم قرار دارند.

هنگامی که یونها از موضوع تعادلی خود جابجا می شوند با فرض اینکه جابجائی ها در قیاس با فاصله بین اتمی کوچک باشد آنگاه می توان در تقریب اول حرکت اتمها را به صورت یک حرکت هماهنگ با پتانسیل موثر سهمی گون تصور کرد (شکل ۳-۱۸).



شکل (۳-۱۸): نمودار پتانسیل بین اتمهای همسایه در یک جامد بر حسب تابعی از فاصله بین اتمی [۴۸].

در این شرایط فرض می شود هر اتم تنها تحت تاثیر بر همکنش نزدیکترین اتمها در شبکه بوده هر اتم حول جایگاههای شبکه با دامنه و فرکانس زاویه ای ثابتی نوسان می کند. در ساده ترین تقریب می توان فقط برهم کنش نزدیکترین همسایه ها را که بیشترین نیرو را بر یکدیگر وارد می کنند در نظر گرفت. آنگاه برای توصیف معادله حرکت دو اتم همسایه می توان مستقیماً معادلات حرکت را بکار برد. برای یک زنجیره یک بعدی متشکل از دو اتم متفاوت جابجائی اتم j ام از موضع تعادلش را با u_j نمایش می دهیم.

در این مدل یک بعدی معادلات حرکت برای دو اتم که محدود به بر هم کنش با دو اتم همسایه خود باشند بصورت زیر در خواهند آمد.

$$\begin{cases} M_1 \frac{d^2 u_j}{dt^2} = D(u_{j+1} - u_j) - D(u_j - u_{j-1}) = D(u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) \\ M_2 \frac{d^2 u_{j+1}}{dt^2} = D(u_{j+2} - u_{j+1}) - D(u_{j+1} - u_j) = D(u_{j+2} - 2u_{j+1} - u_j) \end{cases} \quad (2-3)$$

که D ثابت کشسانی فنرها می باشد. جواب این معادلات برای اتمهای $j-1$ ، j و $j+1$ ام عبارتست از:

$$\begin{aligned} u_{j-1} &= A_2 e^{i(\Omega t - kx)} e^{ika} \\ u_j &= A_1 e^{i(\Omega t - kx)} \\ u_{j+1} &= A_2 e^{i(\Omega t - kx)} e^{-ika} \end{aligned} \quad (3-3)$$

در این روابط A_1 دامنه جابجائی اتمها با جرم M_1 و A_2 دامنه جابجایی اتمهایی با جرم M_2 ، k عدد موج فونونها و Ω فرکانس آنها ست. با جانشانی این معادلات در روابط (۳-۲) و (۳-۳) خواهیم داشت:

$$\begin{cases} -M_1\Omega^2 A_1 = D(A_2 e^{-ika} + A_2 e^{+ika} - 2A_1) \\ -M_2\Omega^2 A_2 e^{-ika} = D(A_1 e^{-2ika} + A_1 - 2A_2 e^{-ika}) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} (-M_1\Omega^2 + 2D)A_1 = D(e^{-ika} + e^{+ika})A_2 \\ D(e^{-2ika} + 1)A_1 = (M_2\Omega^2 - 2D)A_2 e^{-ika} \end{cases}$$

$$\begin{cases} -M_1\Omega^2 A_1 = 2DA_2 \cos ka \\ -2DA_1 \cos ka = (M_2\Omega^2 - 2D)A_2 \end{cases} \quad (۴-۳)$$

با تقسیم این روابط برهم و انجام عملیات ریاضی خواهیم داشت:

$$\Omega^4 - 2D\left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}\right)\Omega^2 + \frac{4D^2}{M_1 M_2} \sin^2 ka = 0 \quad (۵-۳)$$

این رابطه یک معادله درجه دو بر حسب Ω^2 است که ریشه های آن بصورت:

$$\Omega_{\pm}^2(K) = \frac{2D\left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}\right) \pm \sqrt{\left[2D\left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}\right)\right]^2 - \frac{16D^2}{M_1 M_2} \sin^2 Ka}}{2} \quad (۶-۳)$$

$$= D\left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}\right) \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4M_1 M_2 \sin^2 Ka}{(M_1 + M_2)^2}} \right]$$

می باشد و به رابطه پاشیدگی ارتعاشات شبکه (فونونها) موسوم است. ریشه بزرگتر به فونون نوری و ریشه کوچکتر به فونون صوتی معروف است. این رابطه را می توان در اولین منطقه بریلوئن ترسیم کرد چون زنجیره را می توان بصورت یک شبکه با پایه های دو اتمی تصور کرد که بردار انتقال آن $2a$ است یا به عبارت دیگر بردار واحد ابتدایی برای شبکه مستقیم $2a$ است پس اولین منطقه بریلوئن در ناحیه بین $\frac{-\pi}{2a} \leq K \leq \frac{\pi}{2a}$ قرار می گیرد.

الف) در مرزهای منطقه بریلوئن یعنی در $K = \pm \frac{\pi}{2a}$ که $\sin^2 ka = 1$ برای k های کوچک

$\sin ka \approx ka$ رابطه پاشیدگی بصورت :

$$\Omega_{\pm}^2(K) = D \left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \right) \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4M_1 M_2 K a}{(M_1 + M_2)^2}} \right] \quad (7-3)$$

$$\Omega_+(K) = \sqrt{\frac{2D}{M_2} + \frac{2D}{M_1}} = \sqrt{\frac{2D}{M_2}}$$

در خواهد آمد. پس از کمی عملیات ریاضی در زنجیره دو اتمی M_1, M_2 ($M_1 \gg M_2$) خواهیم داشت

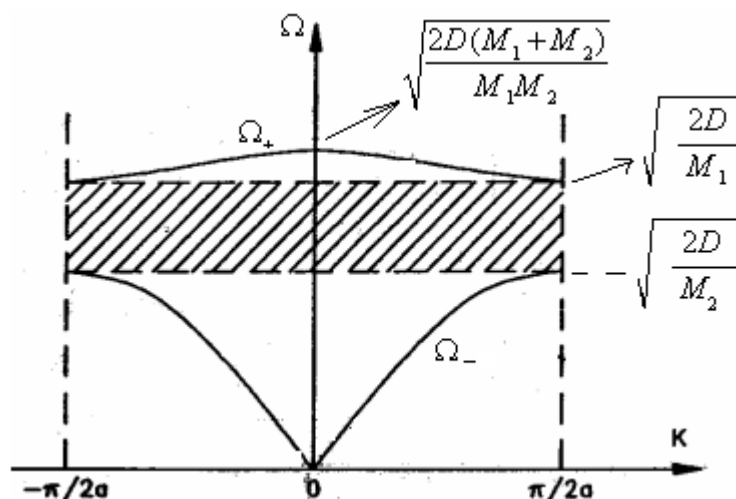
$$\Omega_-(K) = K a \sqrt{\frac{2D}{M_1 + M_2}} = K a \sqrt{\frac{2D}{M_1}} \quad (8-3)$$

ب) در مرکز منطقه بریلوئن (یعنی در $K=0$) فرکانس شاخه فونونهای نوری و صوتی بترتیب عبارتند

$$\lim_{K \rightarrow 0} \Omega_+(K) = \sqrt{\frac{2D(M_1 + M_2)}{M_1 M_2}} \quad \text{از:} \quad (9-3)$$

$$\lim_{K \rightarrow 0} \Omega_-(K) = 0$$

در شکل زیر منحنیهای پاشیدگی برای فونونهای نوری و صوتی نشان داده شده اند. منطقه هاشورزده نوار غیرمجاز است. امواجی که در این منطقه ایجاد می شوند سریعاً میرا شده و نمی توانند انتشار یابند.



شکل (۳-۱۹): منحنیهای پاشیدگی برای فونونهای نوری و صوتی در منطقه اول بریلوئن [۴۸].

همانطور که مشاهده می شود فرکانس فونونهای صوتی وقتی که انرژی آنها بسمت صفر میل می کند ($0K \rightarrow$) صفر می شوند در حالی که فوتونهای نوری دارای بسامد غیر صفر بوده و تقریباً بدون پاشیدگی هستند.

۲-۵-۳ روش تجربی در طیف سنجی رامان:

هنگامیکه تابش الکترومغناطیسی به یک نمونه اتمی یا ملکولی تابیده می شود، در صورتی که انرژی این تابش با فواصل بین ترازهای مجاز انرژی سیستم مورد نظر مطابقت نماید جذب ماده خواهد شد و اگر این انطباق برقرار نشود تابش یا از نمونه عبور می کند و یا پراکنده خواهد شد. در صورت پراکندگی دو حالت عمده ممکن است اتفاق بیفتد.

الف) تابش پراکنده شده می تواند دارای همان طول موج اولیه باشد. در این نوع پراکندگی که به پراکندگی کشسان یا پراکندگی ریلی موسوم است شدت نور پراکنده شده بر حسب طول موج از رابطه $I_s \propto \lambda^{-4}$ پیروی می کند..

ب) تابش پراکنده شده طول موجی متفاوت با طول موج تابش اولیه داشته باشد. در این حالت اگر طول موج تابش پراکنده شده کوچکتر از طول موج تابش اولیه باشد به آن پراکندگی استوکس رامان گویند و در صورتی که طول موج تابش پراکنده شده بزرگتر از طول موج تابش اولیه باشد به آن پراکندگی آنتی استوکس رامان گویند.

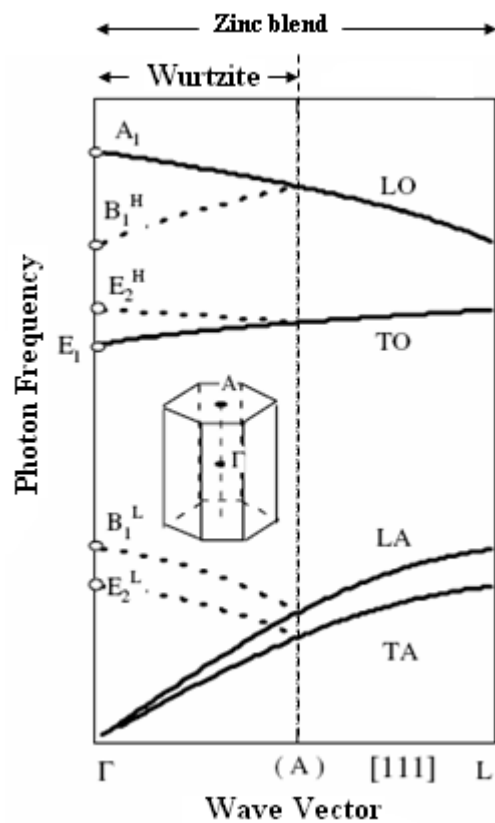
به منظور تشخیص هر چه بهتر اثر رامان لازم است تابش فرودی حتی الامکان تکفام باشد و از آنجا که پراکندگی ایجاد شده خیلی ضعیف است، تابش اولیه باید از شدت بالایی برخوردار باشد. از آنجا که نور لیزر از این ویژگیها برخوردار است، در طیف سنجی رامان معمولاً از یک منبع نور لیزر استفاده می شود.

در زمینه استفاده از طیف سنجی رامان برای تعیین خصوصیات شبکه ای نیمرساناهای نیتروژندار که نمونه های ما نیز از آن دسته اند لازم است ابتدا مروری مختصر بر خصوصیات شبکه بلوری و پراکندگی فونونهای مختلف توسط این شبکه ها داشته باشیم.

همانطور که در بخش (۲-۶-۱) اشاره شد نیمرساناهای نیتروژندار در دو ساختار ششگوشی (ساختار ورتسایت با گروه تقارنی C_{6v}^4) و ساختار مکعبی (ساختار مشابه با سولفور روی از گروه تقارنی T_d^2) متبلور می شوند. در ساختار ورتسایت که پایدارترین ساختار برای آنهاست سلول واحد از دو جفت پیوند Ga-N تشکیل شده در حالی که ساختار مکعبی تنها شامل یک جفت پیوند Ga-N است. در هر دو ساختار هر اتم گالیم با چهار اتم نیتروژن و بطور مشابه هر اتم نیتروژن با چهار اتم گالیم پیوند برقرار کرده است اما آنچه که آنها را در طیف سنجی رامان متمایز می کند تفاوت در چینش جفت لایه های Ga-N است. از آنجا که این چینش در حالت تنگ پکیده برای ساختار مکعبی در راستای کریستالی [۱۱۱] چینشی از نوع ABCABC میباشد در حالی که برای ساختار ورتسایت در راستای کریستالی [۰۰۰۱] از نوع ABAB است (بخش ۲-۶) از این رو طول سلول واحد در ساختار مکعبی معادل با عرض یک جفت لایه Ga-N است در حالی که در ساختار ورتسایت معادل با عرض دو جفت لایه Ga-N است و برعکس این حالت در شبکه وارون، طول سلول واحد ساختار مکعبی دو برابر طول سلول واحد در ساختار ورتسایت است (که بطور شماتیک در قسمت بالای شکل ۳-۲۰ نشان داده شده است). بهمین خاطر ناحیه پراکندگی فونونی در ساختار ورتسایت در راستای کریستالی [۰۰۰۱] که متناظر با راستای $\Gamma \rightarrow A$ (شکل ۳-۲۱) در منطقه اول بریلوئن می باشد دارای یک **تاشدگی**^۱ است. در نتیجه تاشدگی مدهای فونونی نوری و صوتی عرضی در ساختار ورتسایت بجای آنکه همانند ساختار مکعبی از نقطه A به L بروند به نقطه Γ برمی گردند و به مدهای فونونی دیگری تبدیل می شوند که بترتیب به مدهای فونونی E_2^L و E_2^H موسوم شده اند [۴۹]. این مدها در طیف سنجی رامان برای نیمرساناهای نیتروژندار دارای اهمیت زیادی هستند. تحقیقات انجام شده به کمک طیف سنجی رامان بر روی نیمرساناهای نیتروژندار حاکی از آن است که مد فونونی E_2^H به تنشهای درون ساختاری و مد فونونی $A_1(LO)$ به چگالی حاملها حساس است. بنابر این هر تغییری در این کمیتها

^۱ Folding

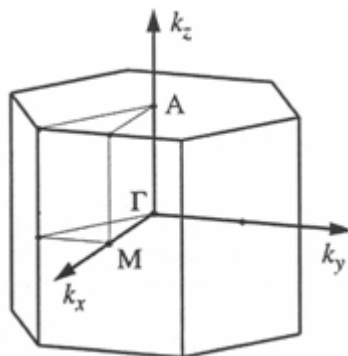
سبب جابجایی قله طیفی وابسته به مد فونونی مورد نظر را بدنبال دارد. ما در فصل بعد مطالعه مد فونونی E_2^H در طیف رامان نمونه خود را تشریح خواهیم کرد.



شکل (۳-۲۰): تصویر شماتیک از پراکندگی فونونی در ساختارهای مکعبی و ورتسایت [۴۷].

در شکل زیر تصویر سلول واحد در شبکه وارون ساختار ورتسایت و مسیر $\Gamma \rightarrow A$ در منطقه

اول بریلوئن مشاهده می شود.



شکل (۳-۲۱): تصویر سلول واحد در شبکه وارون یک ساختار ورتسایت

در طیف سنجی رامان نور لیزر سبب برانگیختگیهای ارتعاشی، چرخشی و قطبشی ملکولها و اتمهای ماده شده و بدین ترتیب پراکندگی نور اتفاق می افتد. در طیف سنجی رامان بیشتر به خاصیت قطبش پذیری (α) ملکولها و اتمهای ماده بوسیله نور پراکنده توجه می شود. قطبش پذیری معرف میزان جابجائی الکترونها نسبت به هسته در یک اتم است. از آنجا که قطبش پذیری همچون سایر خواص فیزیکی مواد جامد نظیر گشتاور لختی، رسانائی الکتریکی و مغناطیدگی خاصیتی ناهسانگرد است بنابراین می توان آنرا به صورت یک تانسور نمایش داد.

برای تعیین مولفه های تانسور قطبش باید در حضور یک میدان الکتریکی خارجی (با قطبیدگی خطی) میزان قطبش ملکولها و اتمهای ماده را در سه راستای متعامد اندازه گیری کرد. بدین منظور در مقابل تابش فرودی یعنی درفاصله بین چشمه لیزر تا نمونه، قطبشگرهای خطی (مثل قطبشگرهای سیمی) قرار می دهند تا بتوانند میدان الکتریکی نور را در راستاهای دلخواه X ، Y ، یا Z قطبیده خطی نمایند. سپس برای هر یک از این میدانها، پاسخ ماده را که می تواند میزان قطبش آن در هر یک از سه راستای X ، Y ، Z باشد به کمک قطبشگر دیگری (که بین نمونه و آشکار ساز قرار دارد) تفکیک و تعیین می نمایند. به عبارت دیگر به ازای هر کدام از سه جهت برانگیختگی ممکن، سه پاسخ در جهت های متفاوت از ماده بروز می کند. به لحاظ ریاضی مجموعه این نه پاسخ می توانند بصورت یک تانسور به نام تانسور قطبش (طبق رابطه زیر) بیان شوند.

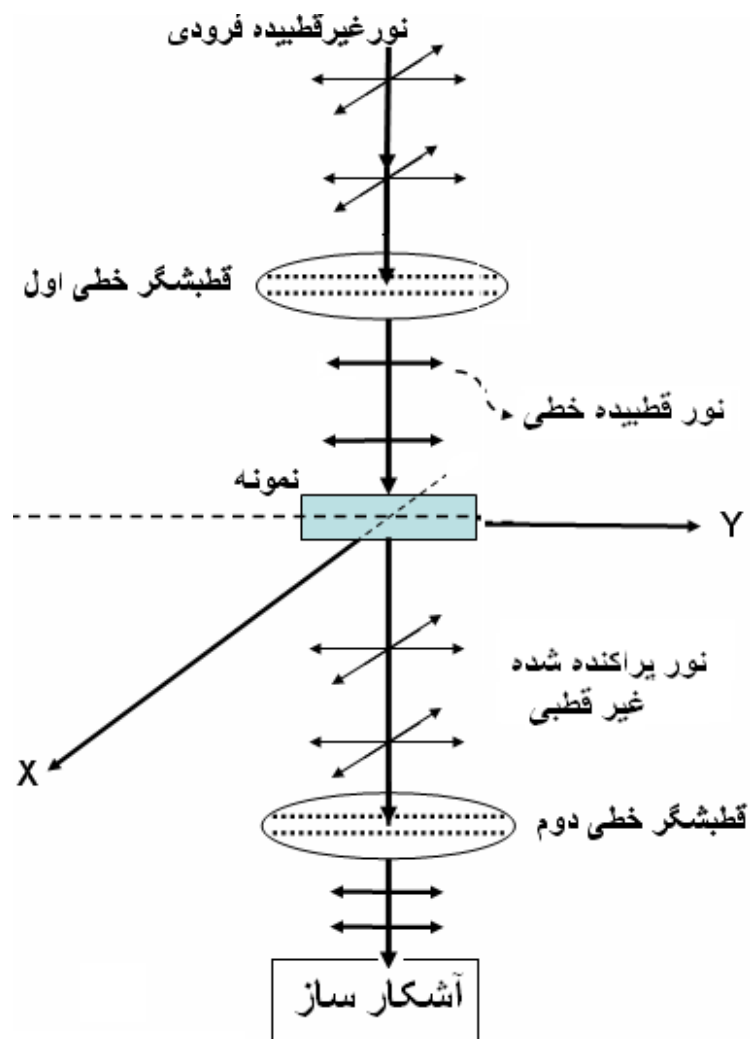
$$\vec{P} = \alpha \vec{E} \Rightarrow \begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{xx} & \alpha_{xy} & \alpha_{xz} \\ \alpha_{yx} & \alpha_{yy} & \alpha_{yz} \\ \alpha_{zx} & \alpha_{zy} & \alpha_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (۱۰-۳)$$

در این رابطه P معرف قطبش و E معرف میدان الکتریکی می باشد. همانطور که در رابطه (۱۰-۳) مشاهده می شود هر یک از عناصر تانسور قطبش دارای دو شاخص هستند، شاخص اول می تواند وابسته سمتگیری قطبشگر اول (جهت میدان الکتریکی فرودی) و شاخص دوم سمتگیری قطبشگر دوم (جهت میدان الکتریکی عبوری) باشد.

متناسب با هر یک از این حالات (عناصر تانسور) بالا یک پیکربندی^۱ برای تجهیزات دستگاه طیف سنج رامان وجود دارد. ما برای مقصود خود که تشخیص مد فونونهای اپتیکی عرضی E_2^H در نمونه است از پیکربندی متناظر با شکل (۳-۲۲) استفاده کرده ایم. لازم به ذکر است که تحقیقات انجام شده در این زمینه نشان داده اند که در نیمرسانای نیتروژندار این مد فونونی شدیداً به کرنشها و تنشهای درونی لایه های نیمرسانای نیتروژندار حساسیت دارد. ما در طیف سنجی خود از یک دستگاه میکروسکوپ مدل HORIBA JOBIN-800 استفاده کردیم. این میکروسکوپ دارای سه چشمه لیزر با طول موجهای مختلف است و ما با اقتباس از گزارشات سایر پژوهشگران که برای تشخیص مدهای فونونهای اپتیکی در نیمرساناهای نیتروژندار از چشمه لیزر با طول موج ۵۱۴nm استفاده کرده اند [۴۶ و ۴۷] همین طول موج را برای نمونه خود بکار بردیم.

در این پیکربندی باریکه فرودی را عمود بر سطح لایه یعنی در جهت Z یا همان راستای بلوری (۰۰۰۱) می تابانند و آشکارساز را هم در امتداد محور Z در آن سوی ماده قرار می دهند. جهت محور عبور قطبشگرها را نیز در راستای محور Y در نظر می گیرند. این پیکربندی را بصورت Z(y,y)Z نیز نمایش می دهند که اولین Z معرف جهت تابش باریکه فرودی و Z دوم معرف جهت باریکه خروجی می باشد. همچنین Y اولی معرف محور تراگسیل قطبشگر اول و Y دومی معرف محور تراگسیل دومین قطبشگر می باشد. به این پیکربندی اصطلاحاً Back Scattering Geometry نیز می گویند [۴۹].

¹ Configuration



(۳-۲۲): پیکربندی $Z(y,y)Z$ در طیف سنج رامان. با این پیکربندی تشخیص مد فونونی اپتیکی عرضی E_2^H در نمونه

آسانتر است .

فصل چهارم

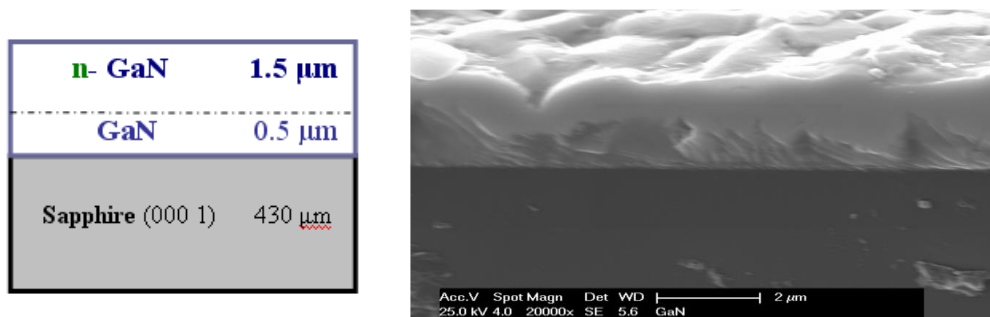
لایه نشانی GaN رشد یافته به روش MOCVD بر روی
زیرلایه Sapphire و بررسی تنشها و کرنشهای گرمائی در
آن

مقدمه

ناهماهنگی بین ثابت شبکه لایه و زیرلایه، همچنین نابرابری ضرایب انبساط گرمایی لایه ها میتوانند سبب محدودیت در کارائی الکتریکی و اپتیکی قطعات وابسته شوند. از جمله عوارض این ناهماهنگیها می توان به تنشها و کرنشهای ساختاری که در حین رشد بلور بیجاد می شوند اشاره کرد. این عوامل می توانند تاثیرات نامطلوبی بر تحرک حاملها داشته و به تشکیل مراکز تله ای برای آنان بیانجامند و یا با ویژگیهای پیزوالکتریکی خود خواص اپتیکی قطعه را تغییر دهند. در این فصل به تشریح کار تجربی خود می پردازیم که به بررسی تنشها و کرنشهای درونی در نمونه اختصاص یافته است. کلیه مراحل رشد و مشخصه یابی این نمونه در دانشگاه صنعتی دارمشتات آلمان انجام شده است.

۴-۱ معرفی نمونه ها و اهداف مطالعه

نمونه مورد نظر ما لایه ای به ضخامت $1.5 \mu\text{m}$ از جنس GaN است که بر روی زیر لایه Sapphire به روش MOCVD روآراستی شده است. از آنجائی که بین این لایه و زیرلایه قدری عدم تطابق ثابت شبکه وجود دارد (بخش ۳-۱-۱) پیش از لایه نشانی لایه GaN از یک لایه واسط از جنس GaN به ضخامت $0.5 \mu\text{m}$ استفاده کرده ایم. شکل (۴-۱) تصویر SEM سطح مقطع این نمونه را به همراه طرح ساده ای از آن نشان می دهد.



شکل (۴-۱) تصویر شماتیک نمونه (سمت چپ) و تصویر SEM (سمت راست) نمونه مورد مطالعه.

هدف ما در این فصل بررسی نوع ساختار و تعیین ثابتهای شبکه ای آن، همچنین مطالعه تنشها و کرنشهای گرمایی در لایه ها و محاسبه کمی آنها می باشد. در بخشهای آتی نخست به شرح جریات رشد و مشخصه یابی نمونه و سپس به بررسی کمی تنشها و کرنشهای موجود در لایه ها می پردازیم.

۲-۴ جزئیات رشد لایه ها

نمونه مورد نظر با روش رسوب گذاری بخار شیمیایی (MOCVD) بر روی زیرلایه Sapphire در راستای (۰۰۰۱) رشد یافته است. در این روش نخست زیر لایه بوسیله حلال پاک کننده استون تمیز شده سپس به مدت سه دقیقه در محیط گازی هیدروژن با دمای حدودا ۱۰۳۰ درجه سانتیگراد قرار گرفت. آنگاه به منظور لایه نشانی GaN (به عنوان لایه واسط) بر روی زیرلایه، پیش ماده های گازی تری متیل گالیم و آمونیم بترتیب بعنوان چشمه های گالیم و نیتروژن وارد محفظه رشد گردیدند. سپس برای لایه نشانی لایه ای ضخیم از GaN (به ضخامت $1/5\mu\text{m}$) با ناخالصی بخشنده سیلیکون علاوه بر مواد قبلی گاز مونوسیلان (SiH_4) نیز بعنوان پیش ماده ای برای سیلیسیوم وارد محفظه شد. از آنجائی که آهنگ رشد لایه ها با شار پیش ماده های گازی ارتباط دارد لذا با محاسبه و تنظیم شار گازها در حین فرایند رشد می توان برآورد نسبتا خوبی از ضخامت لایه ها داشته باشیم البته بمنظور اطمینان بیشتر در سنجش ضخامت لایه ها از ضخامت سنج بلور کوارتز که غالبا یکی از اجزا تعبیه شده در سیستمهای رشد است نیز استفاده شد.

در ادامه به نحوه مشخصه یابی های گوناگون در این نمونه از جنبه های مختلف از جمله مشخصه یابی ساختاری به روشهای تجربی XPS و XRD به منظور تعیین درصد عناصر و میزان ناخالصی لایه ها، همچنین تعیین نوع ساختار و ثابتهای شبکه ای نمونه) و نیز طیف سنجی رامان به منظور یافتن میزان تنشها و کرنشهای درونی ایجاد شده در حین رشد لایه ها می پردازیم.

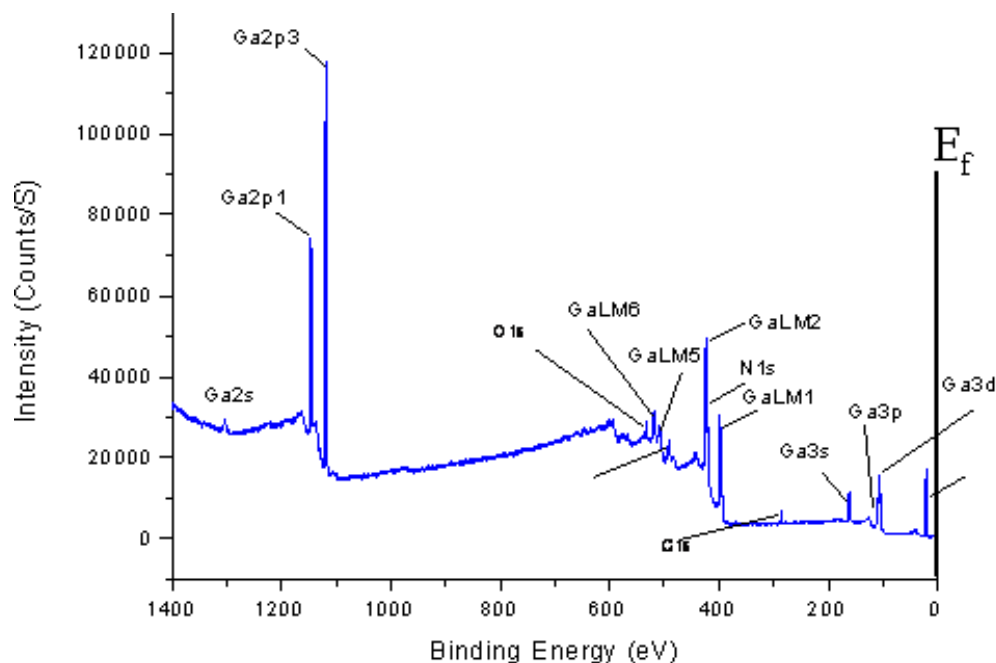
۳-۴ مشخصه یابی ساختاری

۱-۳-۴ بررسی ترکیبات عنصری نمونه به روش XPS

از آنجا که انرژی بستگی الکترونها در هر تراز اتمی بخصوص از یک اتم به اتم دیگر تغییر می کند بنابر این با تعیین انرژی بستگی الکترونها می توان نوع اتمهای تشکیل دهنده یک ترکیب را تشخیص داد (بخش ۳-۳). بر همین اساس در روش طیف نگاری فوتوالکترونی پرتو X، (XPS) پس از تحریک اتمهای نمونه با پرتو ایکس، الکترونها آزاد شده از اتمها (فوتو الکترونها) توسط آشکارساز جمع آوری شده و تعداد آنها در هر انرژی بخصوص شمارش می گردند. بدین ترتیب طیف XPS که نموداری از تعداد الکترونها شمارش شده بر حسب انرژی بستگی آنهاست توسط نرم افزار مربوطه ترسیم می گردد. از تطبیق طیف XPS با داده های مرجع^۱ نه تنها نوع اتمهای ماده قابل تشخیص خواهد بود بلکه با محاسبه سطح زیر قله ها نسبت جرمی عناصر نیز تعیین می گردند.

به منظور انجام این آزمایش در نمونه نخست به روش کندوپاش^۲ یک لایه سطحی از روی نمونه برداشته شد. این عمل به منظور اطمینان از رفع آلودگیهای سطحی در نمونه می باشد. فرایند مذکور توسط یونهای آرگون به مدت یک دقیقه انجام گرفت تا لایه ای به ضخامت ده نانومتر از روی سطح نمونه برداشته شود. پس از انجام این مرحله طیف نگاری XPS انجام گردید (شکل ۴-۲). قله های موجود در این طیف نشانگر آن است که الکترونها جذب شده توسط آشکارساز منتسب به ترازهای ۲s، ۲p، ۳s، ۳p و ۳d اتمهای گالیم و نیز از تراز ۱s اتمهای نیتروژن، اکسیژن و کربن هستند. اطلاعات دریافتی حاکی است که ترکیب اصلی عناصر در نمونه به نسبت حدودا ۵۱/۴ درصد گالیم، ۴۷/۱۹ درصد نیتروژن و مقدار اندکی (در حدود ۱/۴۱ درصد) ناخالصی اکسیژن و کربن است. این نتایج بیانگر خلوص نمونه GaN (شکل ۴-۱) است.

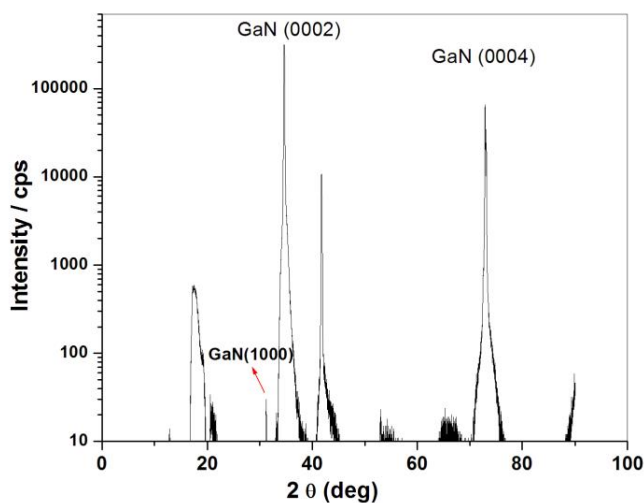
^۱ data base
^۲Sputtering



شکل (۲-۴) : طیف XPS نمونه مورد مطالعه. در این طیف قله های طیفی گالیم و نیتروژن به عنوان عناصر اصلی در ترکیب نمونه و اکسیژن، نیتروژن و کربن به مقدار جزئی به عنوان ناخالصی دیده می شوند. E_f موقعیت انرژی فرمی را در نمونه نشان می دهد.

۲-۳-۴ بررسی ساختاری نمونه توسط طیف سنجی پراش پرتو X (XRD)

طیف سنجی پراش پرتو X (XRD) یکی از روشهای مرسوم برای تعیین ساختار بلوری مواد است. دستگاه مورد استفاده ما طیف سنج XRD از نوع زیمنس D-500 (شکل ۳-۶) بود. در این دستگاه هدف فلزی در لوله پرتو X از جنس مس است و پرتو X تولید شده حاصل گذار اتمی $k\alpha$ در اتم مس بوده و طول موج آن برابر $1/540596$ آنگستروم می باشد. برای دقت بیشتر اندازه گیری در محدوده بین 10° تا 90° درجه با آهنگی آهسته انجام شد به گونه ای که گامهای چرخش آشکارساز $(\Delta\theta)$ برابر با 0.04° درجه و بازه زمانی هر گام 9 ثانیه بود. شکل (۴-۴) طیف XRD نمونه ما را نشان می دهد.



شکل (۳-۴): طیف XRD در نمونه GaN که قله های طیفی متناظر با صفحات بلوری (۱۰۰۰)، (۰۰۰۲) و (۰۰۰۴) در آن دیده می شوند.

همچنانکه مشاهده می شود در این طیف دو قله مرتفع در زوایای 34.6° و 72.9° و یک قله کوتاه در زاویه 17.3° حضور دارند. مقایسه این داده ها با داده های مرجع XRD بیانگر آن است که دو قله با شدت زیاد به ترتیب متناظر با صفحات کریستالی (۰۰۰۲) و (۰۰۰۴) و قله کم ارتفاع متناظر با صفحه بلوری (۱۰۰۰) در ساختار ورتسایت گالیم نیتراید هستند. همچنین پهنای طیفی این قله ها (FWHM) به طور متوسط در حدود 0.63° می باشد که با توجه به مقادیر گزارش شده 1.9° و 1.32° درجه توسط سایر پژوهشگران [۵۱ و ۵۰] حاکی از کیفیت بلوری مناسب در این نمونه است.

علاوه بر این موارد، طیف نگار به کار گرفته شده اطلاعات دقیقتری شامل شدت پرتو X بازتابی و موقعیت زاویه ای 2θ برای هر قله (مربوط به بازتاب براگ از یک صفحه بلوری خاص) را ارائه می دهد. این اطلاعات در مورد نمونه ما در جدول (۴-۱) آمده است.

جدول (۴-۱): نتایج حاصل از طیف نگاری پراش پرتو X از صفحات بلوری مختلف که طیف آن در شکل (۴-۴) نشان داده شده است. نتایج بترتیب شامل زاویه 2θ ، شدت پرتوهای پراشیده و شاخصهای میلر متناظر با صفحات بلوری مختلف می باشد.

شدت (تعداد بر ثانیه)	h, k, l	2θ (درجه)	شدت (تعداد بر ثانیه)	h, k, l	2θ (درجه)
۳۶	۱ ۰ ۰	۳۲/۳۸۸	۱۱۹	۰ ۰ ۴	۷۲/۹۳۹
۱۴۵	۰ ۰ ۲	۳۴/۶۳۱	۱۳	۱ ۰ ۴	۸۲/۰۳۷
۱۰	۱ ۰ ۱	۳۶/۸۵۳	۴۷	۲ ۰ ۳	۹۱/۱۰۶
۱۹	۱ ۰ ۲	۴۸/۰۷۷	۸	۲ ۱ ۱	۹۷/۶۴۷
۳۱	۱ ۱ ۰	۵۷/۷۷۸	۵	۱ ۱ ۴	۹۹/۹۵۳
۲۷	۱ ۰ ۳	۶۳/۴۹۹	۵	۲ ۱ ۲	۱۰۵/۴۰۸
۴	۲ ۰ ۰	۶۷/۸۱۱	۱۰	۲ ۰ ۴	۱۰۹/۱۶۷
۲۲	۱ ۱ ۲	۶۹/۱۰۳	۱۱	۳ ۰ ۰	۱۱۳/۵۷۵
۱۲	۲ ۰ ۱	۷۰/۵۱۰	۸	۲ ۱ ۳	۱۱۹/۰۸۸

با استفاده از موقعیت قله نسبت به هر خانواده صفحات و به کار گیری رابطه براگ ($\lambda=2d \sin\theta$) می توان فاصله بین صفحات بلوری (d) گوناگون را تعیین نمود. همچنین بر اساس اطلاعات ارائه شده در جدول (۴-۲) که روابط وابسته به شاخصهای میلر (h, k, l)، فاصله بین صفحات (d) و ثابتهای شبکه برقرار است می توان ثابتهای شبکه بلور مورد مطالعه را پیدا کرد.

جدول (۴-۲): روابط بین شاخصهای میلر و فاصله بین صفحات بلوری (d_{hkl}) در سیستمهای بلوری مختلف [۵۲].

سیستم بلوری	قیود سیستم	$\frac{1}{d_{hkl}^2}$
مکعبی	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$
تتراگنالی	$a = b$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$
اورتورمبیک	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$
هگزاگنالی	$a = b$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$\frac{4}{3} \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$
تریگنالی	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma$	$\frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + hl + kl)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2(1 - 3\cos^2 \alpha + 2\cos^3 \alpha)}$
منوکلینیک	$\alpha = \gamma = 90^\circ$	$\frac{h^2}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2 \sin^2 \beta} - \frac{2hl \cos \beta}{ac \sin^2 \beta}$

در نمونه مورد مطالعه ما که لایه ای از جنس GaN با ساختار ورتسایت (هگزاگونال) است می توان از اطلاعات سطر چهارم جدول فوق برای تعیین ثابتهای شبکه در نمونه استفاده کرد.

بنابر این با توجه به رابطه براگ خواهیم داشت:

$$\frac{2 \sin \theta}{\lambda} = \sqrt{\frac{4}{3} \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}} \quad (۱-۴)$$

با جانشانی مقادیر وابسته به شاخصهای میلر h, k, l و θ از جدول (۱-۴) و نیز مقدار

$\lambda = 1.540598 \text{ \AA}$ (طول موج پرتو X بکار رفته) ثابتهای شبکه ای لایه بدست می آید. پس از میانگین

گیری مقادیر حاصل عبارتند از: $c = 5/1875$ و $a = 3/187$ آنگستروم. از مقایسه این مقادیر با ثابتهای

شبکه ای [۵۳] برای ساختار کپه ای: $c_0 = 5/185$ و $a_0 = 3/189$ آنگستروم، ملاحظه می شود

ثابتهای شبکه نمونه از ثابتهای شبکه در حالت کپه ای کوچکترند. همچنانکه در بخش (۲-۲-۴) اشاره

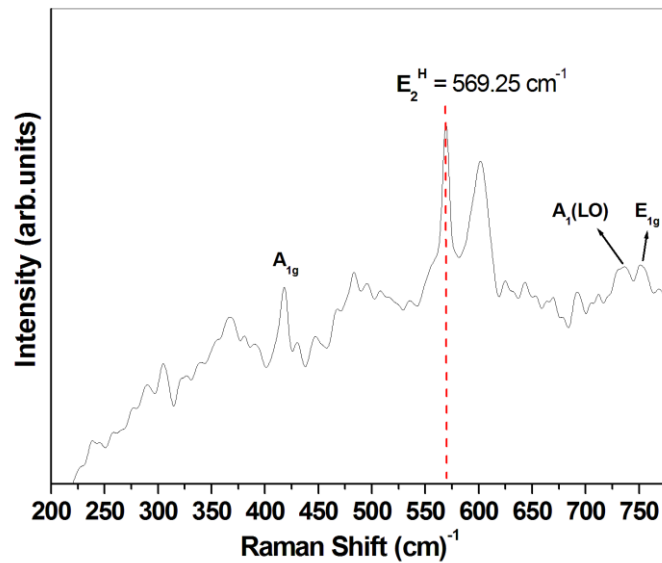
شد انتظار می رود این تفاوت در مقادیر ثابتهای شبکه منجر به تنشها و کرنشهایی در ساختار شبکه شوند. بررسی کمی مربوط به این تنشها و کرنشها در بخشهای بعدی آمده است.

۳-۳-۴ بررسی کیفی تنشها و کرنشهای درونی ساختار به روش طیف سنجی

رامان

همچنانکه در بخش (۳-۵) گفته شد طیف سنجی رامان که مبتنی بر فرایند پراکندگی غیرکشسان نور در مواد است به عنوان یک روش استاندارد در تعیین خصوصیات فیزیکی و ساختار شیمیایی مواد مورد استفاده قرار می گیرد. تحقیقات انجام شده به کمک طیف سنجی رامان بر روی نیمرساناهای نیتروژندار حاکی از آن است که مد فونونی E_2^H به تنشهای درون ساختاری و مد فونونی $A_1(LO)$ به چگالی حاملها حساس است [۴۷] این موضوع به آن معناست که در نمونه های مختلف هر تغییری در این کمیتها یک انتقال در قله طیفی وابسته به مد مورد نظر را بدنبال دارد. با توجه به علاقه مندی خود به بررسی تنشها و کرنشهای موجود در نیمرساناهای نیتروژندار ما نیز به مطالعه مد فونونی E_2^H در طیف رامان نمونه خود پرداختیم.

انجام این آزمایش در نمونه ما (شکل ۴-۴) نشان داد موقعیت قله طیفی وابسته به این مد فونونی E_2^H برابر $569/25 \text{ cm}^{-1}$ می باشد این در حالیست که بنابر سایر گزارشات [۵۴ و ۴۹] قله طیفی مربوط به این مد فونونی در ساختار کپه ای GaN با کرنش قابل چشمپوشی در 568 cm^{-1} مشاهده شده است.



شکل (۴-۴): طیف رامان نمونه که موقعیت قله طیفی وابسته به مد فونونی E_2^H متعلق به لایه GaN بصورت خط چین نشان داده شده است.

این موضوع نشانگر آن است که در نمونه ما قله طیفی E_2^H به مقدار $1/25 \text{ cm}^{-1}$ نسبت به حالت کپه ای بدون کرنش جابجا شده است. این نتیجه می تواند شهادی بر وجود یک تنش قابل ملاحظه در این نمونه باشد. جالب توجه آنکه حضور تنش در لایه که متاثر از تفاوت بین ثابتهای شبکه ای لایه و زیر لایه است می تواند سبب انحنای لایه نیز بشود. در ادامه به محاسبه کمی تنشها و کرنشهای موجود در این نمونه به دو روش: (۱) بکارگیری داده های پراش پرتو X و (۲) اندازه گیری انحنای ساختار لایه ها می پردازیم.

۴-۳-۴ بررسی کمی تنشها و کرنشهای درونی ساختار

روش اول: بکارگیری داده های پراش پرتو X

با توجه به به نتایج بخش (۴-۳-۲) دریافتیم که لایه GaN مورد نظر دارای ساختار ورتسایت با ثابتهای شبکه ای $a = 3/187$ و $c = 5/1825$ آنگستروم می باشد در حالی که ثابتهای شبکه برای

ساختار کپه ای آن برابر : $c_0 = 5/185$ و $a_0 = 3/189$ آنگستروم [۵۳] هستند. از مقایسه بین این مقادیر می توان دریافت که هر دو مقدار کاهش پیدا کرده اند. این تغییرات در ثابتهای شبکه سبب کرنش تراکمی در صفحه رشد و نیز راستای عمود بر این صفحه (راستای محور C) می شوند که با نسبتهای $\varepsilon_c = \Delta c / c_0$ و $\varepsilon_a = \Delta a / a_0$ تعیین می شوند [۱۹] از طرفی این کرنشها با تنشهای متناظر خود (یعنی σ_c ، راستای [۰۰۰۱] و σ_a در صفحه) توسط روابط [۵۹]:

$$\varepsilon_a = E^{-1} \sigma_a (1 - \nu) \quad (2-4)$$

$$\varepsilon_c = -E^{-1} \sigma_a 2\nu \quad (3-4)$$

$$\varepsilon_c / \varepsilon_a = -2\nu / (1 - \nu) \quad (4-4)$$

بهم مربوط می شوند. در این روابط E مدول یانگ ماده مورد نظر است که مقدار آن برای GaN برابر ۱۹۶ GPa میباشد [۵۶] و ν همان نسبت پواسن است. با توجه به معادله (۴-۴) به راحتی می توان نشان داد که در این نمونه $\nu = 0.28$ می باشد. این مقدار در گستره مقادیر گزارش شده کیم و همکارانش [۵۷] برابر با ۰/۲۶ و پولین و همکارانش [۵۸] برابر ۰/۲۴ است. حال با استفاده از این مقادیر و به کار گیری آن در معادلات (۲-۴) و (۳-۴) می توان مقدار تنش در صفحه (σ_a) را که برابر ۰/۱۷۵±۰/۰۰۳ می باشد بدست آورد.

روش دوم: اندازه گیری انحنای ساختار لایه ها

در ساخت بسیاری از قطعات نیمرسانا از رشد لایه های مختلف که دارای ضرایب انبساط گرمائی متفاوتند استفاده می شود. این لایه نشانی ها معمولا در دماهای نسبتا بالا (در حدود ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد) انجام می شوند. با اتمام فرایند رشد و به هنگام خنک شدن نمونه، ناهماهنگی در ضرایب انبساط گرمائی لایه های مجاور منجر به انحنای این ساختارهای چند لایه ای می شود. این ناهماهنگی در ضرایب انبساط گرمائی نه تنها سبب انحنای لایه ها می شود بلکه کرنشها و تنشها ئی را نیز در پی خواهد داشت. یک روشی که برای تعیین کمی تنشها و کرنشهای درونی ساختار مورد استفاده قرار میگیرد تعیین انحنای این لایه ها و سپس محاسبه تنشها و کرنشهای موجود در این لایه

ها بر اساس روابطی است که بین انحنا و تنش برقرار است. این روابط توسط السن^۱ و اتنبرگ [۵۹] ارائه شدند ما نیز برای یافتن تنش و کرنش در نمونه خود به روش اسلن و اتنبرگ عمل نمودیم. لازم به ذکر است که اندازه گیری انحنای لایه ها را به کمک یک دستگاه پروفیل سنج سطحی^۲ انجام دادیم.

اسلن^۳ و اتنبرگ بر اساس قوانین مکانیک و با فرض اینکه تنشها و کرنشها ناشی از نیروهای درونی ساختار هستند روابطی را بین انحنا و تنش در ساختارهای N لایه ای بدست آوردند که بصورت زیر قابل بیان هستند.

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^{N-1} \left(\varepsilon_i - \varepsilon_{i+1} = \frac{F_{i+1}}{E_{i+1}wt_{i+1}} - \frac{F_i}{E_iwt_i} - \frac{t_i + t_{i+1}}{2R} \right) \quad (۴-۴)$$

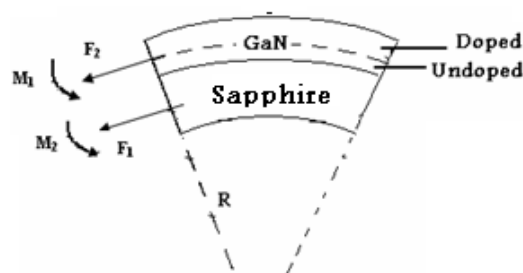
$$M = \sum_{i=1}^N \left(\frac{E_i t_i^3 w}{12R} + F_i \sum_{j=1}^i \left(t_j - \frac{t_i}{2} \right) \right) \quad (۵-۴)$$

در این روابط E, t, w, F, بترتیب مدول یانگ، عرض لایه، ضخامت آن و نیروئی است که لایه را تحت تاثیر قرار می دهد و R شعاع انحنای لایه ها می باشد.

در شرایط تعادل برابند نیروها و گشتاورهای درونی ساختار صفر هستند پس می

$$\begin{cases} \sum_i F_i = 0 \\ \sum_i M_i = 0 \end{cases} \quad \text{توان نوشت:} \quad (۶-۴)$$

برای ساختار دو لایه ای مورد مطالعه ما این نیروها و گشتاورها را میتوان بصورت زیر نمایش داد.



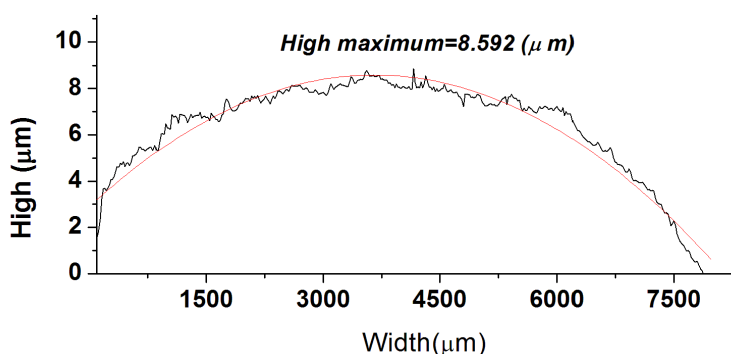
¹ Olsen

² Surface Profilometer

³ Olsen

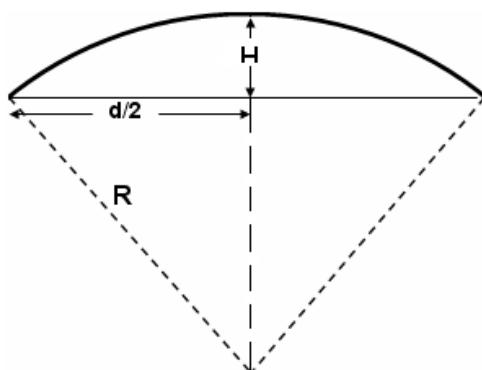
شکل (۴-۵) تصویر شماتیکی از نمونه های مورد مطالعه

در نمونه های ما t_1 (ضخامت لایه Sapphire) و t_2 (ضخامت لایه GaN) بترتیب ۴۳۰ و ۲ میکرومتر و مقادیر متناظر برای E_1 ، E_2 بر اساس گزارش کوزاوا و همکارانش [۵۶] بترتیب ۴۲۵ GPa و ۱۹۶ GPa می باشند در اینحال برای محاسبه کرنش در لایه GaN از طریق رابطه (۴-۴) نیاز داریم که شعاع انحنای لایه ها را نیز بدانیم. بدین منظور با استفاده از یک پروفیلومتر، نمودار انحنای قائم سطح نمونه را بدست آورده که در شکل زیر قابل مشاهده است.



شکل (۴-۶): نمودار انحنای سطحی نمونه های مورد مطالعه.

به منظور یافتن شعاع R در این نمونه با استفاده از داده های شکل (۴-۶) می توان از طرح شکل (۴-۷) استفاده نمود. با توجه به نتایج اندازه گیری پروفیل سنج سطحی مشاهده می شود که در پهنائی در حدود $d = 8000 \mu m$ ، بلندای انحنای نمونه در حدود $H = 8.592 \mu m$ میکرومتر است. در شکل زیر انحنای نمونه و پارامترهای d و H بطور شماتیک نشان داده شده اند.



شکل (۷-۴): تصویر شماتیک نمونه که پارامترهای انحنا (H و d) در آن دیده می شوند.

با توجه به شکل (۸-۴) شعاع انحنا نمونه را می توان از رابطه:

$$R = \frac{H^2 + \frac{d^2}{4}}{2H} \quad (۷-۴)$$

بدست آورد. با جایگذاری داده های مربوطه در این رابطه شعاع انحنا این لایه ها در حدود ۰/۸۶ متر حاصل می شود. همچنین با جایگذاری مقادیر یاد شده در رابطه (۴-۴) کرنشی در حدود $\epsilon_c = 3/345 \times 10^{-4}$ برای لایه GaN تعیین می شود که بر مبنای رابطه (۲-۴) تنش متناظر با آن برابر با ۰/۱۲ GPa می باشد. همانطور که مشاهده می شود نتایج این روش با نتایج روش دوم به مقدار خیلی زیادی مطابقت دارند. همچنین بزرگی تنش (σ) محاسبه شده با جابجائی قله طیفی E_2^H در طیف رامان ($\Delta\omega$) بدست آمده در رابطه $\Delta\omega = 7/1 \pm 0/0.3 \sigma$ صدق می کنند. این رابطه با رابطه $\Delta\omega = 7/9 \sigma$ ارائه شده توسط ریگر و همکارانش [۶۰] قابل مقایسه است. آنها این رابطه را برای لایه های نازک ۷۵۰ نانومتری GaN که به روش MOCVD با لایه واسط AIN بر روی زیر لایه Sapphire رشد یافته بودند، بدست آوردند. در گزارشی دیگر کزاوا و همکارانش [۵۶] رابطه $\Delta\omega = 6/2 \sigma$ را برای لایه های GaN با ضخامت ۲/۵ تا ۵۰ میکرومتر که به روش MOVPE با لایه واسط AIN بر روی زیر لایه Sapphire رشد یافته بودند ارائه نمودند و سر انجام کزیلوسکی و همکارانش [۵۵] رابطه $\Delta\omega = 4/2 \pm 0/3 \sigma$ را برای لایه های GaN با ضخامت ۰/۵ تا ۵ میکرومتر که به روش MBE و بدون لایه واسط بر روی زیر لایه Sapphire رشد یافته بودند بدست آوردند.

۴-۴ نتیجه گیری

بطور خلاصه در این فصل ما وجود تنشها و کرنشهای درون ساختاری در لایه گالیم نیتراید آرایش یافته با سیلیسیوم را که بروش MOCVD بر روی زیر لایه Sapphire رشد یافته اند مورد بررسی قرار دادیم. ما در بررسی خود از چندین روش مشخصه یابی استفاده نمودیم. ابتدا میزان خلوص نمونه را با روش XPS مورد بررسی قرار دادیم که نتایج این طیف نگاری نشان داد درصد وزنی عناصر نمونه به

نسبت حدوداً ۵۱/۴ درصد گالیم، ۴۷/۱۹ درصد نیتروژن و مقدار اندکی (۱/۴۱ درصد) ناخالصی اکسیژن و کربن است که حاکی از خلوص نسبتاً خوب نمونه است. از لحاظ کیفی وجود کرنشها و تنشها در این نمونه با روش طیف سنجی رامان (مشخصاً با میزان جابجائی قله طیفی مربوط به مد فونونی E_2^H) قابل تشخیص است. در طیف رامان نمونه جابجائی قله طیفی مربوط به مد فونونی E_2^H به مقدار $1/25 \text{ cm}^{-1}$ نسبت به قله طیفی حالت کپه ای مشاهده گردید که این موضوع حاکی از وجود کرنش و تنش قابل توجهی در لایه گالیم نیتراید است.

بر اساس مطالعات نظری و تجربی صورت گرفته در این زمینه بزرگی این کرنشها و تنشها را می توان بر حسب اختلاف ثابت شبکه لایه گالیم نیتراید با ثابت شبکه حالت کپه ای آن تعیین نمود. بر همین اساس بعد از تعیین ثابتهای شبکه بروش XRD معلوم شد که لایه GaN در این نمونه دارای ساختار هگزاگونال با ثابتهای شبکه ای $c = 5/1825$ و $a = 3/187$ آنگستروم می باشد در حالی که ثابتهای شبکه برای ساختار کپه ای آن برابر $c_0 = 5/185$ و $a_0 = 3/189$ آنگستروم هستند ما بزرگی این کرنشها و تنشها را محاسبه نمودیم که روابط نظری مربوطه تنشی به بزرگی $0/175 \text{ GPa}$ را در لایه گالیم نیتراید به دست میدهند.

یکی دیگر از آثار کرنشها و تنشهای درون ساختاری ایجاد انحنا در ساختارهای چند لایه ای می باشد. مطالعات انجام شده در این زمینه نشان دادند که از نظر کمی بزرگی این کرنشها و تنشها با شعاع انحنا، ضخامت و مدول یانگ لایه مرتبط است. ما نیز بر اساس این مدل نسبت به تعیین این کرنشها و تنشها اقدام نمودیم. در این باره بعد از آنکه شعاع انحنا نمونه مورد مطالعه را به کمک یک پروفیلومتر تعیین نمودیم، دریافتیم که روابط نظری مربوطه تنشی به بزرگی $0/12 \text{ GPa}$ را در لایه گالیم نیتراید برآورد می کنند که با مقدار تنشی که از روش طیف سنجی پراش پرتو X به دست می آید اختلاف خیلی کمی دارد.

فصل پنجم

محاسبه میدانهای پیزوالکتریکی و خودبخودی در
ساختارهای ناهمگون $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ با ساختار
بلوری ورتسایت

مقدمه

در این فصل به طور کمی به بررسی نظری دقیقتری از میدانهای الکتریکی داخلی وابسته به میدان پیزوالکتریکی (ناشی از کرنشها و تنشهای توصیف شده در بخش ۲-۹) و میدان الکتریکی داخلی خودبخودی (حاصل از تقارن بلوری نسبتاً ضعیف در ساختارهای ورتسایت) می پردازیم که براینند این دو میدان الکتریکی به پدیده نامطلوب اثر حبس کوانتومی استارک (بخش ۲-۹) در ساختارهای چاه کوانتومی منجر می گردد.

ابتدا در بخش (۵-۱) به محاسبه بزرگی میدان پیزوالکتریکی در ساختارهای ناهمگون $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($0 \leq x \leq 1$) پرداخته و در بخش (۵-۲) بزرگی میدان خودبخودی را در لایه چاه (InGaN) در حالت Ga-face تعیین می کنیم. اطلاع از مقادیر این دو میدان می تواند در محاسبه میدان الکتریکی کل درون بلور به ما کمک کند.

۵-۱ تعیین بردار قطبش و میدان پیزوالکتریکی در ساختارهای ناهمگون $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ با ساختار بلوری ورتسایت

با توجه به مطالب ذکر شده در بخش (۲-۹) رشد لایه هائی با ثابت شبکه متفاوت می تواند سبب ایجاد کرنش در فصل مشترک لایه ها شود. وجود این کرنش در فصل مشترک به ویژه در چاههای کوانتومی می تواند به تشکیل بارهای قطبشی و در نتیجه یک میدان الکتریکی موسوم به میدان پیزوالکتریک در داخل ماده منجر شود.

هدف ما در این بخش محاسبه میدانهای پیزوالکتریکی در ساختارهای ناهمگون $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ با ساختار بلوری ورتسایت بر حسب تابعی از کسر مولی ایندیم (X) است. برای رسیدن به این مقصود: ابتدا باید بزرگی قطبش پیزوالکتریکی و سپس میدان پیزوالکتریکی را بر حسب کسر مولی ایندیم (X) بدست آوریم.

به منظور تعیین مولفه های قطبش پیزوالکتریک در ساختار ناهمگون GaN/In_xGa_{1-x}N بایستی تانسور پیزوالکتریک (e_{ij}) را در بردار کرنش (ϵ_{ij}) ضرب کرد [۶۱].

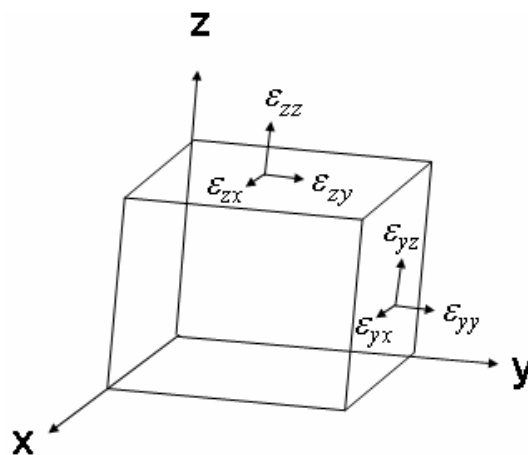
$$P_i = \sum_j e_{ij} \epsilon_j \quad (۱-۵)$$

و یا بصورت تانسوری خواهیم داشت:

$$\begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} & e_{14} & e_{15} & e_{16} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} & e_{24} & e_{25} & e_{26} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & e_{34} & e_{35} & e_{36} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \\ \epsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (۲-۵)$$

همانطور که در این رابطه دیده می شود خاصیت پیزوالکتریکی را می توان بصورت یک ماتریس بیان کرد. این موضوع از آنجا ناشی شده که غالباً کرنش در یک راستای شبکه، می تواند علاوه بر آن راستا در راستاهای دیگر نیز میدان الکتریکی ایجاد کند.

در شکل (۱-۵) برخی از عناصر تانسور کرنش را نشان می دهد. مولفه های ϵ_{xx} ، ϵ_{yy} ، ϵ_{zz} مربوط به کرنشهای تراکمی و یا کششی و عناصر ϵ_{yx} ، ϵ_{yz} ، ϵ_{zx} ، ϵ_{xy} ، ϵ_{zy} ، ϵ_{xz} ، ϵ_{yx} ، ϵ_{yz} ، ϵ_{zx} ، ϵ_{xy} ، ϵ_{zy} ، ϵ_{xz} کرنشهای برشی در صفحه مربوطه می باشند.



شکل (۱-۵): نمایش برخی از عناصر تانسور کرنش در وجوه مختلف یک بلور.

در اینجا برای توصیف این مولفه ها به عنوان مثال به چند مورد اشاره می شود:

بسته به شرایط رشد و تقارنهایی موجود در ساختار این لایه ها این امکان وجود دارد که بعضی از عناصر این تانسورها برابر صفر و بعضی با هم یکی شوند. این موضوع در ساختار مورد نظر ما یعنی رشد لایه های GaN/InGaN نیز صادق است. از آنجا که این ساختارها غالباً به صورت ورتسایت و در جهت (۰۰۰۱) رشد داده می شوند لایه های InGaN تحت تاثیر یک کرنش دو محوری (ϵ_{yy} و ϵ_{xx}) عمود بر راستای (۰۰۰۱) هستند و در جهت رشد تحت تاثیر اثر پواسن (معادله ۵-۳) از کرنش غیر صفر ϵ_{zz} برخوردارند.

$$\epsilon_{zz} = -\nu\epsilon_{xx} \quad (3-5)$$

با فرض ناچیز بودن کرنشهای برشی در این ساختارها سه مولفه دیگر بردار کرنش یعنی ϵ_{xy} ، ϵ_{zx} و ϵ_{yz} برابر صفر خواهند بود [۶۲ و ۶۳] مولفه های غیر صفر بردار کرنش در چاه کوانتومی ساختار GaN/InGaN را می توان بنابر تعریف کرنش از روابط زیر بدست آورد:

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_s - a_l}{a_s} \quad (4-5)$$

$$\epsilon_{zz} = -\frac{2C_{13}}{C_{33}}\epsilon_{xx} \quad (5-5)$$

در این روابط a_s و a_l بترتیب ثابتهای شبکه لایه های *InGaN*، *GaN* و C_{13} ، C_{33} ثابتهای سختی کشسانی^۱ لایه مورد نظر هستند. مقادیر مربوط به این کمیتها در مورد لایه های *InGaN*، *GaN* آنها در جدول (۵-۱) آمده است. ما در محاسبات خود برای لایه های آلیاژی InGaN مشابه با تاکائوچی و همکارانش [۶۱] از کمیتهای فیزیکی InN استفاده کرده ایم.

¹ Elastic Stiffness Constant

جدول (۵-۱): برخی پارامترهای فیزیکی $InGaN, GaN$ که در محاسبه کرنش و قطبش پیزوالکتریکی این لایه ها بکار می آیند. a ثابت شبکه، e_{31} و e_{33} ثابتهای پیزوالکتریکی و C_{33} ثابت سختی کشسانی مواد مورد نظر هستند.

	a (Å)	e_{33} (C/m ²)	e_{31} (C/m ²)	e_{24} (C/m ²)	C_{33} (GPa)	C_{13} (GPa)
GaN	۳/۱۸۹	۰/۶۵	-۰/۳۴	-۰/۳۴	۳۸/۱	۱۱/۴
InN	۳/۵۴۸	۰/۴۳	-۰/۲۲	-۰/۲۲	۳۸/۱	۱۱/۴

با به کارگیری رابطه (۵-۳) و جایگزینی پارامترهای مربوطه از جدول فوق خواهیم داشت:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{3.189 - [3.189(1-x) + 3.548x]}{[3.189(1-x) + 3.548x]} = \frac{-0.359x}{3.189 + 0.359x} \quad (۶-۵)$$

$$\varepsilon_{zz} = -2 \frac{11.4}{38.1} \left(\frac{-0.359x}{3.189 + 0.359x} \right) = -0.598 \left(\frac{-0.359x}{3.189 + 0.359x} \right) \quad (۷-۵)$$

در رابطه (۶-۵) برای محاسبه ثابت شبکه لایه $In_xGa_{1-x}N$ از قانون وگارد استفاده شده است (X معرف کسر مولی ایندیم در ترکیب $In_xGa_{1-x}N$ می باشد).

در بلورهای شش گوشه (وابسته به گروه تقارنی C_{6v}) بنابر روابط تقارنی بین عناصر تانسور پیزوالکتریک انتظار می رود که: $e_{31} = e_{32}, e_{15} = e_{24}, e_{33} \neq 0$ [۶۳ و ۶۴] و بجز این پنج عنصر سایر عناصر این تانسور برابر صفر هستند.

اکنون با جایگذاری عناصر تانسور پیزوالکتریک و همچنین عناصر بردار کرنش در معادله (۵-۲) این رابطه به صورت زیر در خواهد آمد:

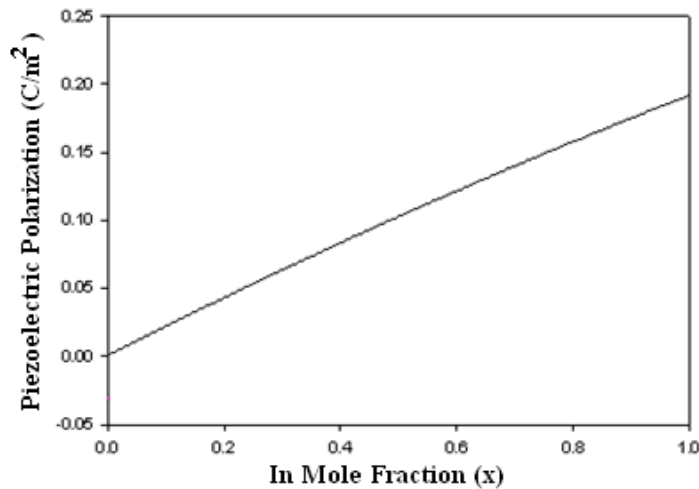
$$\begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -0.22 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.22 & 0 & 0 \\ -0.22 & -0.22 & 0.43 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{-0.359x}{3.189 + 0.359x} \\ \frac{-0.359x}{3.189 + 0.359x} \\ -0.598 \left(\frac{-0.359x}{3.189 + 0.359x} \right) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (۸-۵)$$

با انجام این محاسبات می توان مولفه های قطبش پیزوالکتریک را در این سیستم دو لایه ای بدست آورد که در می یابیم:

$$P_z = \frac{0.25034x}{3.189 + 0.359x} \quad (9-5)$$

$$P_x = p_y = 0 \quad (10-5)$$

این نتایج حاکی از آن است که وجود کرنش در صفحه رشد، به قطبشی منجر نمی شود، لکن کرنش ایجاد شده در امتداد رشد بخاطر اثر پواسن به یک قطبش غیر صفر میل می کند. شکل (۲-۵) تغییرات P_z را برحسب تابعی از کسر مولی ایندیم (X) نشان می دهد.



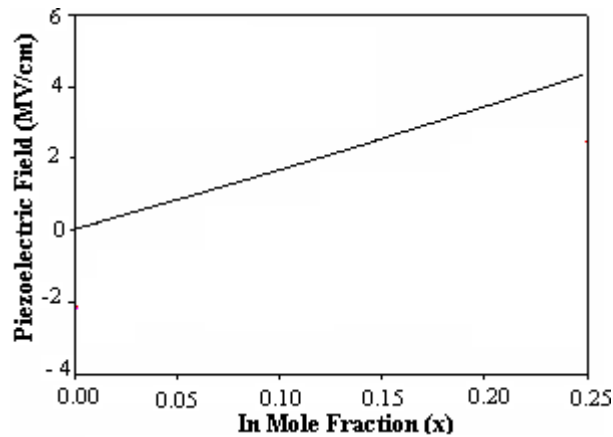
شکل (۲-۵): نمودار تغییرات قطبش

خودبخودی و قطبش پیزوالکتریک بر حسب تغییرات کسر مولی ایندیم در ساختار $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

اکنون با اطلاع از مولفه های بردار قطبش پیزوالکتریکی می توان میدان الکتریکی وابسته به آن را با در نظر گرفتن ثابت دی الکتریک ماده از معادله:

$$E_z(x) = \frac{P_z}{K\epsilon_0} \quad (11-5)$$

محاسبه کرد. با توجه به آنکه $P_x=P_y=0$ انتظار می رود مولفه های $E_x=E_y=0$ باشد. لذا تنها مولفه موثر میدان الکتریکی در امتداد محور رشد (Z) خواهد بود. نتیجه این محاسبات در شکل (۳-۵) نشان داده شده است. در این محاسبات، K (ثابت دی الکتریک برای لایه InGaN است که برابر با $10/4$ در نظر گرفته شده است [۲۴و۶۱]).



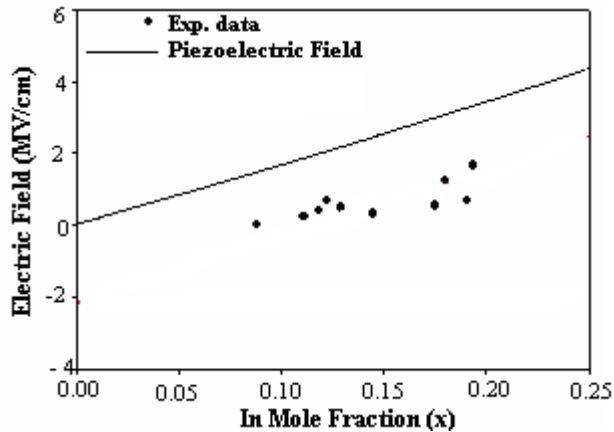
شکل (۵-۳): نمودار تغییرات میدان پیزوالکتریک بر حسب تغییرات کسر مولی ایندیم در ساختار $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

ما با استفاده از نتایج این روش محاسباتی درصد برآمدیم که تغییرات میدان الکتریکی را بر حسب کسر مولی ایندیم برای نمونه های $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ ($0/194 \leq x \leq 0/86$) که توسط وتزل همکارانش رشد داده شده بودند [۶۴]. تعیین نمائیم. نمونه های مورد مطالعه بروش MOCVD بر روی زیر لایه Sapphire رشد یافته اند و همگی دارای یک چاه کوانتمی در ساختار خود هستند. در جدول (۵-۲) اندازه کسر مولی ایندیم در این نمونه ها بیان شده است.

(جدول ۵-۲): میزان کسر مولی ایندیم در نمونه های مورد مطالعه که همگی در ساختار خود دارای یک چاه کوانتمی $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ هستند [۶۴].

نمونه	نمونه	نمونه	نمونه	نمونه	نمونه	نمونه	نمونه	نمونه	
نمونه نهم	نمونه هشتم	نمونه هفتم	نمونه ششم	نمونه پنجم	نمونه چهارم	نمونه سوم	نمونه دوم	نمونه اول	
0/194	0/19	0/18	0/173	0/143	0/122	0/117	0/11	0/86	کسر مولی ایندیم در نمونه

میدان الکتریکی در این نمونه ها بصورت دایره های توپر در شکل (۵-۴) نشان داده شده اند.



شکل (۴-۵): تغییرات میدان الکتریکی بر حسب کسر مولی ایندیم برای نمونه های GaN/In_xGa_{1-x}N/GaN [۶۴].

همانطور که در شکل مشاهده می شود این داده های تجربی با منحنی موجود در شکل (۴-۵) که از محاسبات ما در بخش قبل اتخاذ شده انطباق ندارند. این اختلاف می تواند ناشی از نادیده گرفتن میدان الکتریکی خودبخودی در ساختار مورد نظر باشد. بنابر این لازم است که بزرگی میدان مذکور در این ساختار تعیین شود.

۵-۲ تعیین بزرگی میدان الکتریکی خودبخودی در ساختارهای چاه

کوانتومی GaN/In_xGa_{1-x}N/GaN

همانطور که در بخش (۲-۹) اشاره شد ترکیبات نیتروژندار نظیر GaN و InGaN در ساختارهای ورتسایت به دلیل تقارن بلوری ضعیف و اختلاف الکترونگاتیویته عناصر تشکیل دهنده همواره تحت تاثیر یک قطبش خودبخودی خواهند بود. بزرگی این قطبش را می توان با استفاده از رابطه زیر به دست آورد [۶۵].

$$P_{In_xGa_{(1-x)}N}^{SP} = x P_{In}^{SP} + (1-x) P_{GaN}^{SP} + b'x(1-x) \quad (۱۲-۵)$$

در این عبارت x نشانگر کسر مولی ایندیم، P_{GaN}^{SP} و P_{In}^{SP} بزرگی قطبش خودبخودی برای ترکیبات GaN و InN که بترتیب برابر با: -0.032 (C/m^2) و -0.029 (C/m^2) و b' (پارامتر خمش)^۱ مربوطه برابر 0.037 می باشد [۶۵].

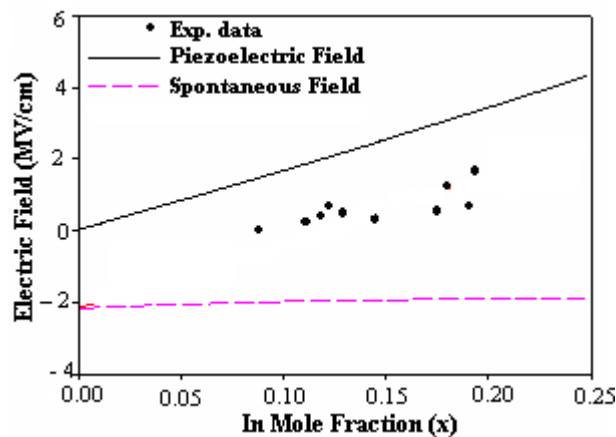
با استفاده از این داده ها و بر مبنای رابطه (۵-۱۲) می توان تغییرات قطبش خودبخودی برای ترکیب $In_xGa_{(1-x)}N$ را بر حسب کسر مولی ایندیم (x) بصورت زیر نوشت:

$$P^{SP}(x) = x(-0.032) + (1-x)(-0.029) + 0.037x(1-x) \quad (۱۳-۵)$$

میدان الکتریکی مربوطه را نیز می توان با اعمال ثابت دی الکتریک از رابطه زیر بدست آورد.

$$E^{SP}(x) = \frac{P^{Sp}(x)}{K\epsilon_0} = -\frac{0.037x^2 - 0.034x + 0.029}{K\epsilon_0} \quad (۱۴-۵)$$

شکل (۵-۵) نمودار تغییرات این میدان را بر حسب کسر مولی ایندیم برای ترکیب $In_xGa_{(1-x)}N$ نشان می دهد.



شکل (۵-۵): نمودار تغییرات میدان الکتریکی خودبخودی و میدان پیزوالکتریک بر حسب کسر مولی ایندیم که به روش محاسباتی بدست آمده اند. دایره های توپر مقادیر اندازه گیری شده میدان الکتریکی کل را برای نمونه های جدول ۵-۱ نشان می دهند.

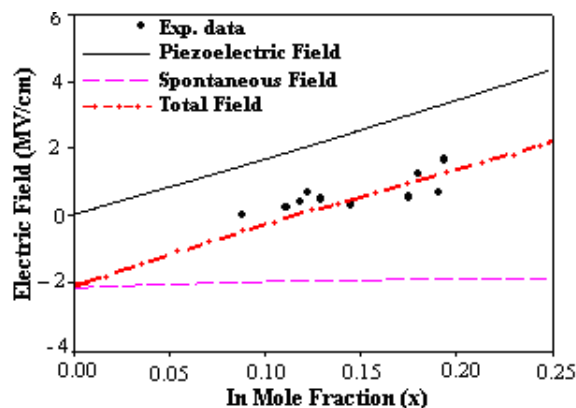
¹ Boeing Parameter

اینک با معلوم شدن بردار قطبش خودبخودی و قطبش پیزوالکتریک می توان قطبش کل را از جمع برداری آنها بدست آورد.

۳-۵ محاسبه بزرگی میدان الکتریکی کل در ساختار چاه کوانتومی



بردار قطبش بصورت: $\vec{P}_{total} = \vec{P}_{PZ} + \vec{P}_{SP}$ تعریف می شود. با توجه به مطالب ذکر شده در بخش (۲-۹) بنابر جهت دوگانه ای که \vec{P}_{PZ} (برحسب نوع کرنش) می تواند داشته باشد و نیز جهت دوگانه ای که \vec{P}_{SP} برحسب نوع قطبیت Ga-face یا N-face میتواند داشته باشد اندازه بردار قطبش کلی از جمع یا تفاضل اندازه این دو بردار بدست می آید. همانطور که در بخش (۲-۹) بدان اشاره شد در نمونه های Ga-face همانند نمونه های تجربی مورد بررسی در این فصل میدان خودبخودی مخالف جهت رشد (جهت -Z) و دارای مقادیر منفی است در حالی که میدان پیزوالکتریکی همسو با جهت رشد بوده و طبق شکل (۳-۵) دارای مقادیر مثبت است. بنابر این بزرگی میدان الکتریکی کل از تفاضل قدر مطلق این دو میدان بدست می آید. در شکل (۶-۵) نمودار تغییرات این میدانها بر حسب کسر مولی ایندیم ترسیم شده است. نکته جالب توجه این است که مقادیر اندازه گیری شده برای میدان الکتریکی کلی با مقادیر محاسباتی (منحنی خط نقطه چین) انطباق خوبی دارند.



شکل (۶-۵): نمودار تغییرات میدان الکتریکی خودبخودی، میدان پیزوالکتریک و میدان الکتریکی کل که به روش

محاسباتی بدست آمدند. دایره های توپر نیز مقادیر اندازه گیری شده میدان الکتریکی کل را نشان می دهند [۶۴].

نتیجه گیری

در ساختارهای ناهمگون اختلاف ثابت شبکه لایه چاه با لایه های مجاور یک عامل مهم در ایجاد کرنش در لایه چاه بوده که به ایجاد بردار قطبش و سرانجام به یک میدان پیزوالکتریکی در این لایه منجر می شود. از محاسبات بکار گرفته دریافتیم در ساختارهای ناهمگون $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ با افزایش کسر مولی ایندیم (x) بردار قطبش و نیز میدان پیزوالکتریکی مربوطه افزایش می یابد این افزایش به ازای $x = 0.25$ به حدود 4 MV/cm می رسد.

در ساختارهای با چاه کوانتمی $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ملاحظه گردید که تنها با در نظر گرفتن اثر میدان پیزوالکتریکی وابسته به تفاوت ثابت شبکه ای لایه چاه و سد نمی توان چگونگی تغییرات میدان الکتریکی درونی این ساختار را توجیه نمود. محاسبات ما با در نظر گرفتن جمع برداری اثر میدان الکتریکی خودبخودی (ناشی از تقارن ضعیف بلوری در ساختار ورتسایت) و میدان پیزوالکتریک می تواند رفتار داده های تجربی گزارش شده توسط وتزل و همکارانش [۶۴] را توصیف نماید.

فصل ششم

مطالعه اثر حبس کوانتومی استارک ناشی از میدانهای پیزوالکتریکی
در ساختارهای GaN /InGaN /GaN با چاههای کوانتومی
چندگانه

مقدمه

همانگونه که در فصل پنجم دریافتیم در ساختارهای ناهمگون که ساختارهایی متشکل از چند لایه نیمرسانا با گاف نواری، ثابتهای شبکه ای و ضرایب انبساط گرمایی متفاوت هستند، کرنشهای درونی می توانند سبب ایجاد بارهای قطبشی در فصل مشترک لایه ها شوند. وجود این قطبش خود می تواند به تولید یک میدان الکتریکی داخلی موسوم به میدان پیزو الکتریکی منجر شود. از جمله آثار نامطلوب این میدانها در قطعات اپتوالکتونیک کاهش شدت نور گسیل شده (ناشی از کاهش همپوشانی توابع موج حاملها) و نیز کاهش انرژی تابشی (انتقال بسوی قرمز) در طیف گسیلی آنهاست (بخش ۲-۹). ما در این فصل به طور کمی به توصیف تغییرات طیف فوتولومینسانس بر حسب عرض چاه در ساختارهای با چاه کوانتومی چندگانه GaN/InGaN/GaN می پردازیم که توسط تاکائوچی و همکارانش گزارش شده است [۶۱]. این روند کاهشی انرژی گسیلی هنگامی که پهنای چاه در حال افزایش است بر مبنای اثر حبس کوانتومی استارک (QCSE) قابل توضیح می باشد.

۶-۱ معرفی نمونه های و اهداف مطالعه

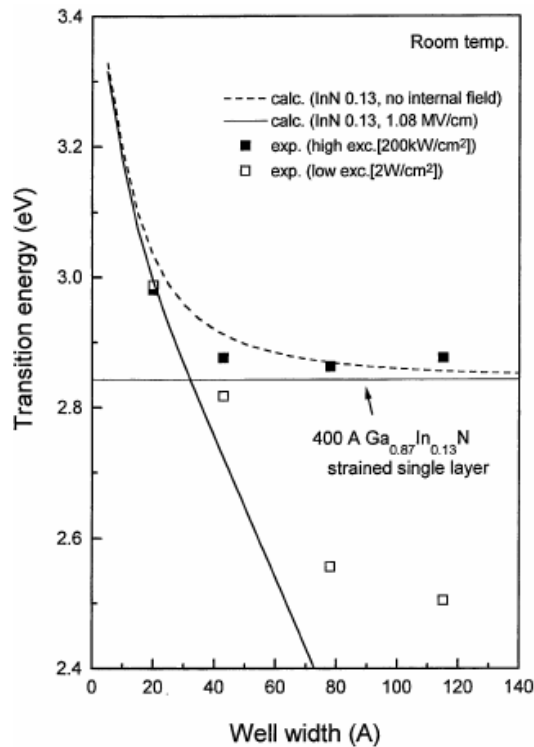
نمونه های مورد بررسی ما متشکل از ساختارهای مبتنی بر چاههای کوانتومی کرنش دار GaN/In_{0.13}Ga_{0.87}N/GaN هستند که همگی آنها به روش MOVPE رشد یافته اند اطلاعات مربوط به ضخامت لایه ها و تعداد چاههای کوانتومی این نمونه ها در جدول (۶-۱) آمده است.

جدول (۶-۱): برخی از ویژگیهای ساختاری نمونه های مورد مطالعه [۶۱].

نمونه	تعداد چاههای کوانتومی در نمونه	عرض چاهها (بر حسب آنگستروم)	عرض سدها (بر حسب آنگستروم)
۱	۱۰	۲۰	۲۰
۲	۱۰	۴۳	۴۳
۳	۵	۷۸	۷۸
۴	۳	۱۱۵	۱۱۵

این نمونه ها بر روی زیرلایه Sapphire در راستای (۰۰۰۱) بترتیب زیر لایه نشانی شده اند. به هنگام رشد این نمونه ها بر روی زیرلایه، نخست لایه ای واسط از AlN به ضخامت ۳۰۰ آنگستروم و پس از آن یک لایه ضخیم از GaN به ضخامت ۲ میکرومتر قرار گرفته آنگاه ناحیه فعال که شامل چندین چاه کوانتومی است لایه نشانی شده است. تاکائوچی و همکارانش بمنظور مقایسه این نمونه ها با نمونه ای بدون کرنش است، نمونه پنجم را از نوع کپه ای رشد دادند. در این نمونه آنها بجای چاههای کوانتومی از یک لایه ضخیم ۴۰۰ آنگسترومی از $\text{In}_{0.13}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ استفاده کرده اند. می توان انتظار داشت در این نمونه تنش ایجاد کننده میدان پیزوالکتریک ناچیز بوده و آثار حبس کوانتومی استارک در آن قابل چشمپوشی باشد.

آنها به منظور بررسی تجربی اثر حبس کوانتومی استارک و تعیین انتقال بسوی قرمز از طیف نگاری فوتولومنیسانس در دو مرحله به شرح زیر استفاده کردند. شکل (۶-۱) نتایج اندازه گیریهای تجربی مربوط به این نمونه ها به همراه محاسبات انجام گرفته را در دو وضعیت (الف) بکارگیری یک چشمه تابنده کم شدت (لیزر He-Ne با شدت $2\text{W}/\text{cm}^2$) بصورت مربعهای سفید و (ب) چشمه تابنده بسیار پر شدت (لیزر N_2 با شدت $200\text{ kW}/\text{cm}^2$) بصورت مربعهای سیاه نشان می دهد. انتظار می رود علت تغییر موضع در انرژی فوتولومنیسانس هر نمونه در شرایط برانگیختگی شدید حاملها (در حضور چشمه تابنده پرشدت) در مقایسه با شرایط برانگیختگی ضعیف به اثر استتار کنندگی حاملها نسبت داده شود. چنانچه از شکل پیداست اگرچه این گروه پژوهشی از لحاظ نظری بخوبی موفق به پیش بینی داده های تجربی در شرایط برانگیختگی شدید شده اند (نمودار خط چین) لکن در شرایط برانگیختگی ضعیف (حضور اثر حبس کوانتومی استارک) برای تمام نمونه ها این موفقیت حاصل نشده است. ما با محاسبات خود در این فصل سعی کرده ایم این نتایج تجربی را به کمک نظریه اختلال غیر وابسته به زمان در یک چاه پتانسیل متناهی مورد بررسی قرار دهیم.



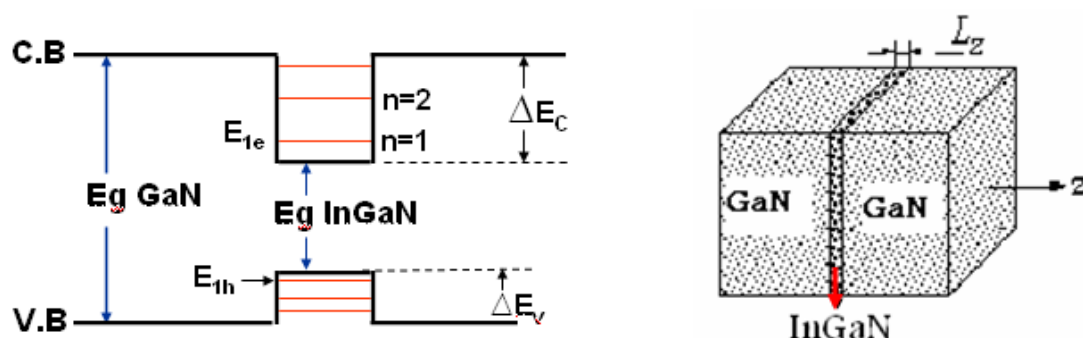
شکل (۶-۱): نتایج طیف نگاری فوتولومینسانس برای چهار نمونه GaN/InGaN/GaN با چاه کوانتومی به عرضهای متفاوت ۲۰ تا ۱۲۰ آنگستروم. مربعهای سفید انرژی گذار نمونه ها در حضور یک چشمه تابشی با شدت پایین و مربعهای سیاه انرژی گذار نمونه ها یک چشمه تابشی بسیار پر شدت است. خط افقی در انرژی ۲/۸۴ eV وابسته به پیش بینی نظری انرژی گذار بین لبه نوار رسانش و نوار ظرفیت در InGaN کپه ای است [۶۱].

در ادامه به تشریح کار نظری خود به منظور توصیف رفتاری این داده ها به کمک نظریه اختلال غیر وابسته به زمان می پردازیم. در این راه ابتدا بر پایه قواعد مکانیک کوانتومی شکل توابع موج ذرات (الکترونها و حفره ها) و ویژه مقادیر انرژی مربوط به آنها را در داخل چاه کوانتومی متناهی در غیاب میدانهای الکتریکی داخلی تعیین نموده، سپس پتانسیل ناشی از میدان پیزوالکتریکی را به عنوان عامل اختلالی در محاسبات در نظر می گیریم. سرانجام در مرحله آخر بمنظور دستیابی به انطباق هر چه بیشتر با داده های تجربی از وابستگی جرم موثر حاملها به عرض چاه کوانتومی استفاده کرده ایم.

۶-۲ تعیین شکل توابع موج و ویژه مقادیر انرژی در ساختار تک چاه

کوانتومی متناهی GaN / InGaN / GaN

در غیاب میدانهای الکتریکی داخلی انتظار می رود که در ساختار مورد نظر ما (یعنی چاه کوانتومی GaN / InGaN / GaN) نابرابری گاف نواری در لایه های مجاور سبب تشکیل یک چاه کوانتومی مربعی در نوار رسانش و یک چاه کوانتومی مربعی متناهی در نوارهای رسانش و ظرفیت شود (شکل ۶-۲).



شکل (۶-۲): چیدمان لایه ها و ترازهای انرژی مجاز در نمونه مورد مطالعه که یک ساختار GaN / InGaN

با یک چاه کوانتومی متناهی است.

با توجه به اصول مکانیک کوانتومی می دانیم در صورت متناهی بودن چاه کوانتومی امکان نفوذ توابع موج حاملهای درون چاه به سدهای مجاور امکان پذیر می گردد. بدین ترتیب لازم است شکل جدید توابع موج و طیف انرژی مربوط به آنها را در اینگونه چاهها در نظر بگیریم. انتظار می رود در نظر گرفتن این فرض برای توابع موج بتواند انتقال به سوی قرمز ناشی از اثر حبس کوانتومی استارک را به صورت واقع بینانه تری ارائه دهد تا نتایج نظری و تجربی از انطباق بیشتری برخوردار باشند. برای یافتن توابع موج ذرات به طور معمول باید از معادله شرودینگر آغاز کرد. بدین منظور ابتدا باید انتخاب مناسبی برای هامیلتونین ذرات در این سیستم که تنها یک حرکت دو بعدی برای آنها متصور است داشته باشیم. با در نظر گرفتن پدیده حبس کوانتومی، هامیلتونین یک ذره (الکترون یا حفره) محبوس در یک چاه کوانتومی به دو قسمت قابل تفکیک است، قسمت وابسته به Z (راستای رشد) و قسمت

وابسته به صفحه X و Y. بدین ترتیب بسته موج می تواند بصورت حاصلضرب ویژه توابع محدود به صفحه X-Y در ویژه توابعی در جهت Z بیان شوند. ویژه توابع در صفحه X-Y به صورت امواج تخت بوده اما در جهت Z، و همسو با راستای رشد بلور (محور ۰۰۰۱) از حل معادله شرودینگر یک بعدی زیر قابل حصول اند.

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi(z)}{dz} \right] + V(z)\psi(z) = E\Psi(z) \quad (1-6)$$

که در آن m^* جرم موثر حاملها، E انرژی کل ذره و V عمق چاه پتانسیلی است که الکترونها یا حفره ها در آن حبس شده اند. در مسئله ما این کمیت ناشی از اختلاف گاف انرژی لایه های سد و چاه $[=E_g(\text{GaN}) - E_g(\text{InGaN})]$ می باشد. این تفاوت انرژی شامل سهم ΔE_c (عمق چاه کوانتومی نوار رسانش) و سهم ΔE_v (عمق چاه کوانتومی نوار ظرفیت) در ساختار GaN/InGaN بنابر گزارش وندوال و نوگباور [۶۵] نسبتی برابر $\frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} = 4$ دارند.

به منظور تعیین توابع موج در چاه و سدها، با در نظر گرفتن یک چاه متقارن به عرض $2a$ داریم:

$$\begin{cases} C \exp(-kz) & z > a \\ \psi_1(z) + \psi_2(z) & -a < z < a \\ D \exp(kz) & z < -a \end{cases} \quad (2-6)$$

به طوری که

$$\psi_1(z) = A \cos(qz) \quad (3-6)$$

$$\psi_2(z) = B \sin(qz) \quad (4-6)$$

و شاخصهای ۱ و ۲ بترتیب نشانگر حالت‌های پایه و برانگیخته، همچنین q, k اعداد کوانتومی توابع موج در سد و چاه عبارتند از:

$$k(z) = \left\{ \frac{2m^*[E_n - V]}{\hbar^2} \right\}^{1/2} \quad q(z) = \left\{ \frac{2m^*[E_n]}{\hbar^2} \right\}^{1/2} \quad (5-6)$$

از اعمال شرایط مرزی (پیوستگی تابع موج و مشتقاتش در مرزهای سد و چاه) و نیز بهنجارش تابع موج می توان ضرائب A, B را بدست آورد. این در صورتی امکانپذیر است که برای تعیین A فرض

کنیم $B = 0$ و $A \neq 0$ و برای تعیین B فرض کنیم $A = 0$ و $B \neq 0$. با انجام این محاسبات به نتایج

زیر می‌رسیم:

$$B^2 = \frac{1}{\frac{\cos^2 qa}{k} - \frac{\sin 2qa}{2q} + a}$$

$$A^2 = \frac{1}{\frac{\cos^2 qa}{k} + \frac{\sin 2qa}{2q} + a} \quad (6-6)$$

از آنجا که می‌خواهیم اثر حبس کوانتومی استارک را در چاههایی با عرض‌های گوناگون (z) مورد بررسی قرار دهیم می‌توان معادله (6-3) را به صورت زیر تعمیم داد:

$$k(z) = \left\{ \frac{2m^*[E_n(z) - V]}{\hbar^2} \right\}^{1/2} \quad q(z) = \left\{ \frac{2m^*[E_n(z)]}{\hbar^2} \right\}^{1/2} \quad (7-6)$$

که در آن $E_n(z)$ بیانگر حالت‌های انرژی کوانتومی حاملها به ازای اعداد کوانتومی مختلف n است.

۶-۳ محاسبه اثر حبس کوانتومی استارک در چاه(های) کوانتومی

متناهی

۶-۳-۱ جرم موثر ثابت

در محاسبه اثر حبس کوانتومی استارک فرض کرده ایم که: (الف) طیف انرژی حاملها در چاه(های)

نمونه مورد مطالعه را بتوان با طیف انرژی در یک چاه کوانتومی نامتناهی به صورت:

$$E_n(z) = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2m^* z^2 \quad (8-6)$$

تقریب زد. (ب) بازترکیبهای تابشی عمدتاً بین الکترون‌ها و حفره‌ها در حالت‌های پایه در ساختار چاه

کوانتومی کرنش دار $\text{GaN} / \text{In}_{0.13}\text{Ga}_{0.87}\text{N}$ رخ دهند و (ج) انرژی پتانسیل ناشی از میدانهای الکتریکی

(پیزو الکتریکی) با بزرگی $F = 1/0.8 \text{ MV/cm}$ [61] به عنوان عامل اختلالی در چاههای متقارن در

نظر گرفته می شود. بنابر این فرضیات انتقال انرژی (ΔE) در هر حالت انرژی در نوار رسانش

(ظرفیت) بر حسب مرتبه عامل اختلالی بصورت یک چند جمله ای به صورت :

$$\Delta E = \Delta E^{(1)} + \Delta E^{(2)} \quad (9-6)$$

است که در آن

$$\Delta E^{(1)} = \langle \psi_1 | eFz | \psi_1 \rangle \quad (10-6)$$

$$\Delta E^{(2)} = \sum_h \frac{|\langle \psi_1 | eFz | \psi_h \rangle|^2}{E_h - E_1} \quad (11-6)$$

جمله اول (معادله ۱۰-۶) که وابسته به اختلال مرتبه اول است برابر صفر خواهد بود. علت آن است که در چاههای متقارن، تابع موج حالت پایه (Ψ_1) دارای پاریته زوج بوده، لکن عامل اختلالی eFz دارای پاریته فرد می باشد. در نتیجه این انتگرالده (تابع درون براکت) یک تابع فرد بوده و انتگرال هر تابع فرد در یک بازه متقارن صفر خواهد بود. اما جمله دوم (معادله ۱۱-۶) که وابسته به اختلال مرتبه دوم است صفر نخواهد شد زیرا توابع موج در ترازهای انرژی (Ψ_h) بالاتر از حالت پایه ($h = 2, 4, 6, \dots$) دارای پاریته فرد بوده، در این حالت انتگرالده یک تابع زوج خواهد بود.

ضمناً یک برآورد تقریبی نشان می دهد که در این جمع بندی تنها اولین جمله که شامل حالت برانگیخته (Ψ_2) است جمله غالب است زیرا در معادله (۱۱-۶) مخرج کسر یعنی ($E_h - E_1$) در جمع بندی مربوطه متناسب با $n_h^2 - n_1^2$ (یعنی $1^2 - 2^2$ ، $2^2 - 4^2$ ، $3^2 - 6^2$ ، ...) تغییر می کند. بنابر این می توان نوشت:

$$\Delta E = \Delta E^{(2)} \approx \frac{|\langle \psi_1 | eFz | \psi_2 \rangle|^2}{E_2 - E_1} \quad (12-6)$$

با توجه به معادلات (۳-۶) و (۴-۶) خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | eFz | \psi_2 \rangle &= \int_{-a}^a (A \cos qz)(B \sin qz)(eFz) dz \\ &= AB eF \left[\frac{\sin 2qz}{2q} - a \cos 2qa \right] \end{aligned} \quad (13-6)$$

$$\Delta E^{(2)} = \frac{\left\{ ABeF \frac{\left[\frac{\sin 2qa}{2q} - a \cos 2qa \right]}{2q} \right\}^2}{\frac{n_2^2 \pi^2 \hbar^2}{2m^*(2a)^2} - \frac{n_1^2 \pi^2 \hbar^2}{2m^*(2a)^2}} \quad \text{با جانشانی در معادله (۱۲-۶) داریم:} \quad (۱۴-۶)$$

که در آن $n_1=1$ برای حالت پایه و $n_2=2$ را برای نخستین حالت برانگیخته در نظر می گیریم. بنابر

$$\Delta E^{(2)} = \frac{\frac{2}{3} e^2 F^2 m^* a^2 \left[\frac{\sin 2qa}{2q} - a \cos 2qa \right]^2}{\pi^2 \hbar^2 q^2} A^2 B^2 \quad \text{این:} \quad (۱۵-۶)$$

در حالت کلی برای چاهی با پهنای متغیر Z داریم :

$$\Delta E^{(2)} = \frac{2}{3} \frac{e^2 F^2 m^*}{\pi^2 \hbar^2} f(z) \quad (۱۶-۶)$$

که در آن

$$f(z) = z^2 \frac{\left[\frac{\sin[q(z)z]}{2q(z)} - \frac{z}{2} \cos[q(z)z] \right]^2}{[q(z)]^2} [A(z)B(z)]^2 \quad (۱۷-۶)$$

بخش وابسته به Z انتقال به سوی قرمز QCSE است. از آنجا که بنابر گزارش دیویس [۶۶]. مقدار

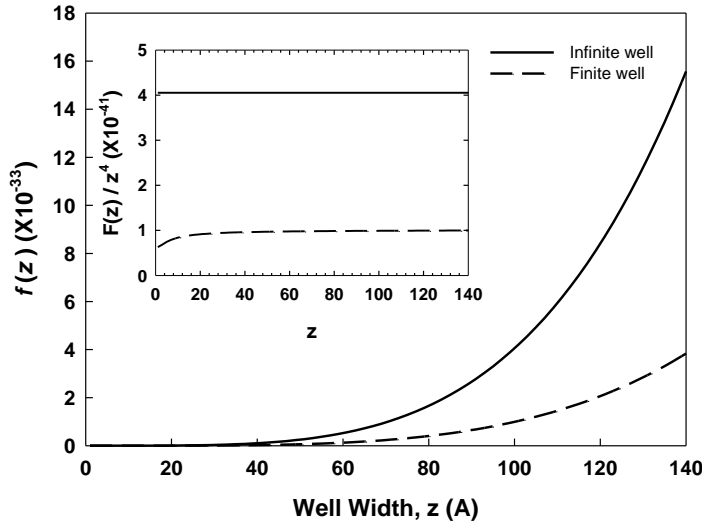
انتقال به سوی قرمز در یک چاه کوانتومی نامتناهی با عرض چاه به صورت Z^4 وابستگی دارد، ما نیز

سعی کردیم این وابستگی را برای چاه کوانتومی متناهی محاسبه و با آن مقایسه کنیم. شکل (۳-۶)

تغییرات $f(z)$ را بر حسب Z برای چاههای کوانتومی متناهی و نامتناهی نشان می دهد. در این شکل

نمودار الصافی نشانگر تغییرات $f(z)/Z^4$ بر حسب Z است. همانطور که آشکار است هر دو نمودار از

وابستگی یکسانی با Z (پهنای چاه) برخوردارند و تنها در ضرایب ثابتشان با هم تفاوت دارند.



شکل (۳-۶): نمودار تغییرات $f(z)$ بر حسب Z برای چاههای کوانتومی متناهی (خط چین) و نامتناهی (خط توپر). نمودار الصاقی نشانگر تغییرات $f(z)/z^4$ بر حسب Z برای چاههای مذکور است.

همانطور که انتظار می رود انتقال به سوی قرمز شامل دو مولفه است، سهم وابسته به جابجائی تراز انرژی در نوار رسانش و سهم مربوط به جابجائی در نوار ظرفیت، یعنی:

$$\Delta E_{tot}^{(2)} = \Delta E_C^{(2)} + \Delta E_V^{(2)} \quad (18-6)$$

بدین ترتیب بلحاظ نظری انرژی گذار ($E_{transition}$) با در نظر گرفتن بحث فوق برابر خواهد بود با:

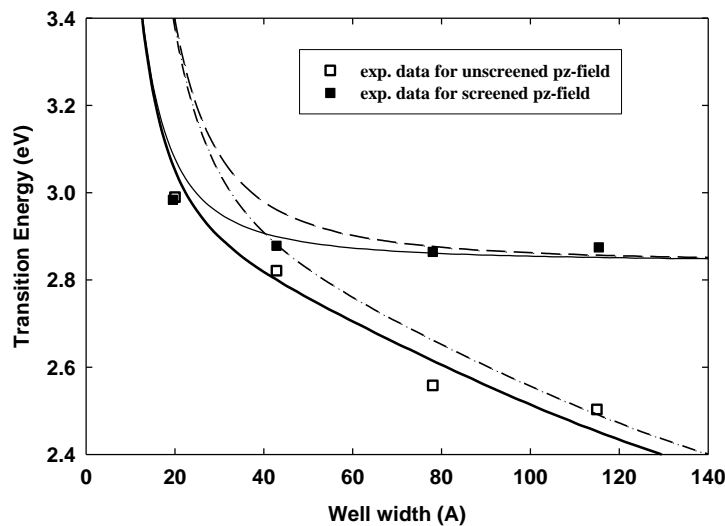
$$E_{trans.} = [E_g(bulk) + E_{1(e)}(z) + E_{1(h)}(z)] - \Delta E_{tot}^{(2)} \quad (19-6)$$

که در آن جمله اول مربوط به انرژی گذار در غیاب QCSE و جمله دوم نشان دهنده تاثیر میدانهای پیزو الکتریکی داخلی (معادله ۱۸-۶) در کاهش انرژی گذار است.

در اینجا در معادله (۱۹-۶) کمیت $E_g(bulk) = 2/84 \text{ eV}$ گاف انرژی [۶۱] و E_{1e} , E_{1h} بترتیب ترازهای انرژی حالت پایه الکترونها و حفره ها در چاه کوانتومی است که از معادله (۸-۶) حاصل می شود.

نتایج حاصل از بر مبنای مدل نظری در خصوص پیش بینی تغییرات انرژی گذار بر حسب عرض چاه به ازای $m_e^* = 0.2m_0$ و $m_h^* = 1.1m_0$ (جرم الکترون آزاد) در نظر گرفته شده اند. نتایج بدست

آمده در شکل (۴-۶) نشان داده شده اند. در این شکل منحنی های خط چین و خط نقطه چین بترتیب مربوط به پیش بینی مدل ما در حالت استتار شده میدان پیزوالکتریکی (نخستین جمله معادله ۶-۱۹) و نیز در حضور میدان پیزوالکتریکی (معادله ۶-۱۹) هستند.



شکل (۴-۶): تغییرات انرژی گذار در طیف فوتولومینسانس بر حسب تابعی از عرض چاههای کوانتومی در سیستم GaN/InGaN/GaN. مربعهای توپر و توخالی بترتیب متناظر با قله های طیف فوتولومینسانس تجربی در شرایط برانگیختگی بالا و پایین و منحنیهای خط چین و خط نقطه چین انرژیهای گذار محاسباتی را در حالتی که جرم موثر حاملها ثابت در نظر گرفته شده نشان می دهد. منحنیهای توپر ضخیم و نازک نیز انرژیهای گذار محاسباتی را در حالتی که جرم موثر حاملها وابسته به عرض چاه در نظر گرفته شده اند نشان می دهند.

همانطور که پیداست این دو منحنی انطباق نسبتاً خوبی با داده های تجربی به ویژه در چاههای با پهنای بزرگتر از ۸۰ آنگستروم از خود نشان می دهند، ولی در چاههای باریکتر برازش مدل نظری و داده های تجربی چندان رضایتبخش نمی باشد. به منظور بهبود محاسبات خود، در این مدل دست به اصلاح زده ایم. با توجه به این واقعیت که در چاههای کوانتومی متناهی باریکتر توابع موج حاملها از نفوذ بیشتری در نواحی سد برخوردارند ما از روش لانگ و همکارانش [۶۷]. در سیستمی متشکل از

چاههای کوانتومی CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe با در نظر گرفتن وابستگی جرم موثر حاملها به عرض چاه به

صورت:

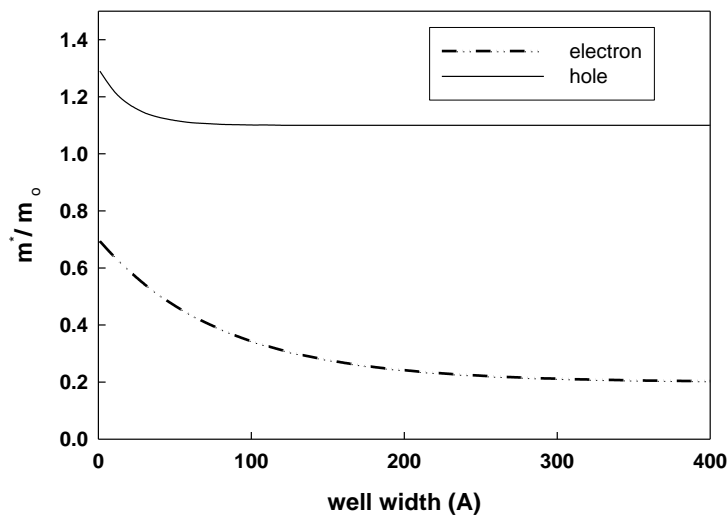
$$m^*(z) = m_{bulk}^* + m' e^{-z/L} \quad (20-6)$$

استفاده کرده ایم. در این معادله ضرایب m', L مقادیر ثابتی فرض می شوند و در محاسبات می توانند به عنوان پارامترهای برازش محسوب شوند.

۲-۳-۶ جرم موثر وابسته به عرض چاه $m^*(z)$

در این مرحله با در نظر گرفتن معادله (۲۰-۶) مدل نظری خود در بخش ۱-۳-۶ را مجدداً به کار گرفتیم همچنانکه از نتایج نظری شکل (۴-۶) با خطوط توپر تازک و ضخیم بترتیب برای شرایط استتاری و غیر استتاری ملاحظه می شود بکارگیری این تصحیح به برازش مناسبتر نتایج محاسباتی با داده های تجربی منجر می شود.

در این تحلیل ما مقادیر m', L بترتیب برابر ۸۰ آنگستروم و $0.5m_0$ برای الکترونها و ۲۰ آنگستروم و $0.2m_0$ برای حفره ها بدست آمدند. شکل (۵-۶) تغییرات جرم موثر حاملها را بر حسب تابعی از عرض چاه با احتساب ضرایب برازشی فوق برای الکترونها و حفره ها نشان می دهد. با توجه به این نتایج مقادیر مربوط به جرم موثر الکترونها در چاههای کوانتومی کوچکتر از 150 \AA و جرم موثر حفره ها در چاههای کوانتومی کوچکتر از 50 \AA بمرور از مقادیر شرایط کپه ای فزونی گرفته است. این تغییرات افزایشی در مورد الکترونها در چاههای کوانتومی با عرض 20 \AA در حدود سه برابر و در مورد حفره ها در حدود ده درصد می باشد.



شکل (۶-۵): نمودار تغییرات جرم موثر حاملها بر حسب تابعی از عرض چاه کوانتومی در نمونه مورد مطالعه.

نتیجه گیری:

ما در این فصل بر اساس یک مدل نظری وابستگی اثر حبس کوانتومی استارک را به عرض چاههای متناهی در ساختارهای MQW متشکل از GaN/In_{0.13}Ga_{0.87}N/GaN تعیین نمودیم. به منظور تعیین انرژی گذار بین حالت‌های پایه الکترون و حفره در چاههای کوانتومی با عرض متفاوت، ابتدا تابع موج حاملها را در این چاهها تعیین نمودیم سپس پتانسیل ناشی از میدان پیزوالکتریکی را به عنوان یک عامل اختلالی در این مدل دخالت دادیم و محاسبات مربوطه را در دو حالت زیر انجام دادیم: در حالت اول جرم موثر حاملها را ثابت در نظر گرفتیم و در حالت دوم آنها را تابعی از عرض چاه در نظر گرفتیم. ما در یافتیم که در حالت دوم نتیجه محاسبات انجام شده با داده های تجربی [۶۱] انطباق مناسبی دارند.

مراجع:

- 1-W. C. Johnson, J. B. Parsons and M. C. Crew (1932), Journal of Physics Chemistry **234**,pp 2651.
- 2-R. Juza, E. Hahn, Z. Angor and A. Chem. (1938), Journal of Physics Chemistry, **234**, pp 282.
- 3-H. P. Maruska, D. A. Stevenson, J. I. Pankove. (1937), Journal of Applied Physics Letter, **22**, pp 303.
- 4-H. Grimmeiss, H. Koelmans: Z. Naturfg. (1959), Journal of Applied Physics Letter, **14a**, 264.
- 5- H. P. Maruska, J.J. Tietjen. (1969), Journal of Applied Physics Letter, **15**, 327.
- 6- J. I. Pankove, E. A. Miller, J. E. Berkeyheiser. (1972), journal of luminescence, **5**, pp 84
- 7- Akasaki, T. Kozowa, K. Hiramatsu, N. Sawak, K. Ikeda, Y. Ishii. (1988), Journal of luminescence, **40**, 121.
- 8-J. A. Van Vechten, J. D. Zook, R. D. Horning (1992) "Defeating Compensation in Wide Gap Semiconductors by Growing in H that is Removed by Low Temperature De-Ionizing Radiation " Jpn. Journal of Applied Physics Letter, **31**, 3662.
- 9- S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh. (1991), "Highly P-Typed Mg-Doped GaN Films Grown with GaN Buffer Layers", Journal of Applied Physics Letter, **30**, L1998.
- 10- H. Amano, M. Kito, K. Hiramatsu, I. Akasaki. (1989), P-Type Conduction in Mg-Doped GaN Treated with Low-Energy Electron Beam Irradiation (LEEBI) " Jpn Journal of Applied Physics, **28**.
- 11- H.Amano et al, (1994), Journal of Applied Physics Letter, **64**, 1687.
- 12- S. Nakamura, T. Mukai (1994), Journal of Applied Physics Letter, **64**, 1687.
- 13- Daniel. Steigerwald (1997) "III-V Nitride Semiconductors for High-Performance Blue and Green Light Emitting Devices" Journal of material, **49**,pp 18.
- 14- G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang and Esaki (1989) "Variation calculation on a quantum wells in an electric field" Physical Review B, **28(6)**, 3241-3245.
- 15- S. Tripathy, R. K. Soni, H. Asahi, K. Iwata, R. Kuroiwa, K. Asami, and S. Gonda (1999) "optical properties of GaN layers grown on C-, A-, R-, and M-plane sapphire substrates by gas source molecular beam epitaxy "J. Appl. Phys. **85 (12)**, 8386-8399
- 16- S. P. DenBaars and S. Nakamura, (2007). Jpn. J. Appl. Phys. L284-L286, Vol 46
- 17- B. Neubert, P. Brückner, F. Habel, F. Scholz, T. Riemann, J. Christen, M. Beer and J. Zweck (2001), phys.stat.sol.(a) 188, No.2, 523-526.
- 18- S. P. DenBaars, and S. Nakamura, (2007). Jpn. J. Appl. Phys. L284-L286, Vol 46.
- 19- G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang and Esaki (1989) "Variation calculation on a quantum wells in an electric field" Physical Review B, **28(6)**, 3241-3245.
- 20- D. S. Mui, M. B. Patil, H. Mokoc, (1989) "Calculation of the electron wave function in a graded-channel b double heterojunction modulation- doped field effect transistor (1989) " Journal of Applied Physics Letter, **55 (12)**, 1223-1225.
- 21-G. Gonzales, H. Herrera and A. Calderon (2007) "Effect of giant electric fiels on the optical properties of GaN quantum wells " Journal of Revista mexicana De Fisica , **53(4)**, 303-306.
- 22- H. M. Rosenberg (1988), The Solid State Physics, Third Edition, Chapter 8, Oxford University Press.
- 23- B.G. Streetman. (1990), Solid State Electronic Divices, Third Edition, Prentice-Hall.
- 24- H. Morkoc. (1999), Nitride Semiconductors and devices, Springer Verlage.
- 25- C.M. Wolf, N. Hholonyak,Jr. ,and G.E. Stillman.(1989),Physical Properties of Semiconductors, Prentice-Hall, International Editions.
- 26- C. Kittel, (1986) Introduction to Solid State Physics, 6th ed., New York: Wiley,
- 27- S. Strite and H. Morkoc. (1992), GaN, AlN, and InN: A review, J.Vac. Sci. Technol. ,**B10**,1237.
- 28- J. Dalfors. (1999), *Photoluminescence Studids of the electronic Structures in some III-V Quantum Structures*; dissertation No.560, Linkoping University.
- 29- B. Gil. (2002), "*Low-Dimentional Nitride Semiconductors*", edited by Oxford University Press.
- 30- V. Fiorentini; F. Bernardini; F. Della seala; A. Di Carlo; P. Lugli. (1999), J. Phys. Rev. B **60**, No. 12 ; P.8849.
- 31- J. H. Davies. (1998), "*The Physics of Low-Dimentional Semiconductors, An Introduction*" Cambridge University Press.
- 32- J. Dalfors; (1999). *Photoluminescence Studids of the electronic Structures in some III-V Quantum Structures*; dissertation No.560, P. 8, Linkoping University- IFM.

- 33- G. V. de Walle; (1989), Phys. Rev. B 39, 1871.
- 34- O. Ambacher; J. Majewski; C. Miskys; A. Link; M. Hermann; M. Eickhoff; M. Stutzmann; F. Bernardini, V. Fiorentini; V. Tilak, B. Schaff and L. F. Eastman (2002), J. Phys. Condens. Matter 14.
- 35- O. Ambacher; B. Foutz; J. Smart; J. R. Shealy; N. G. Weimann; K. Chu; M. Murphy; A. J. Sierakowski; W. J. Schaff; L. F. Eastman; R. Dimitrov; A. Mitchell and M. Stutzmann. (2000), J. Phys. 87, 334.
- 36- C. T. Foxon; B. A. Joyce. (1990), "Growth of thin films and heterostructures of III-V compounds by molecular beam epitaxy, in Growth and Characterization of Semiconductors; ed. By R. A. Stradling; P. C. Klipstein (Hilger, Bristol) p. 35.
- 37- Y. Golan, P. Fini, D. Dahan, F. Wu, S. Zamir, J. Salzman, and J.S. Speck (2003), "High-quality GaN on intentionally roughened c-sapphire", Eur. Phys. J. AP.
- 38- Takashi Matsuoka. (2005), Journal of Superlattices and Microstructures 37, 19-32.
- 39- Raj. Singh, R.J. Barrett, J.J. Gomes, Ferdynand P. Dabkowski, T.D. Moustakas. (2000), MRS Internet Journal Research Nitride Semiconductor.
- ۴۰- سوالانی هادی، (۱۳۸۵) "فیزیک لایه های نازک" چاپ دوم، انتشارات مرکز نشر دانشگاهی.
- 41- Mario Birkholz, (2006), "Thin film analysis by X-ray scattering" WILEY – VCH Verlag and Co. KGaA, Weinheim, ISBN: 3-527-31052-5.
- 42- J. F. Moulder, W. F. Stickle, P. B. Sobol, K. D. Bomben. (1992) "Handbook of X-ray photoelectron Spectroscopy" United States, Library of Congress, ISBN:0-9648124.
- 43- R. Jhonson, (1996) "Environmental Scanning Electron Microscopy an introduction to SEM" Second Edition, Netherland.
- 44 - S.Y. Lin and C.W. Dence (1992) "Methods in Lignin Chemistry Raman Spectroscopy" chapter 4. by R.H. Atalia, U.P. Agarwal, and J.S. Bond Springer Series in Wood Science, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- ۴۵- دکتر غلامرضا اسلامپور (۱۳۸۲) "طیف سنجی ملکولی" انتشارات دانشگاه پیام نور.
- 46- M. M. B"ulb"ull, S.R.P. Smith¹, B. Obradovic¹, T.S. Cheng³, and C.T. Foxon. (2000), "Raman spectroscopy of optical phonons as a probe of GaN epitaxial layer structural quality" Eur. Phys. J. B 14, 423-429.
- 47- H. Harima, (2002) "Properties of GaN and related compounds studied by means of Raman scattering" J. Phys. Condens. Matter, 14, R967–R993.
- ۴۸- استفان کوچ، آندره میزیروویچ، ترجمه دکتر حمید رضا مهاجری مقدم و دکتر حبیب تجلی (۱۳۸۰)، "مقدمه ای بر نورشناخت نیمه رساناها" چاپ اول، انتشارات آستان قدس رضوی.
- 49- F. C. Wang¹, C. L. Cheng¹, Y. F. Chen¹, C. F. Huang and C. C. Yang (2007) "Residual thermal strain in thick GaN epilayers revealed by cross-sectional Raman scattering and cathodoluminescence spectra" IOP PUBLISHING SEMICONDUCTOR SCIENCE AND TECHNOLOGY
- 50- N. Chaaben, T. Boufaden, A. Fouzri, M. S. Bergaoui and B. El. Jani, (2006), j. Applied Surface Science, 253, 241-245.
- 51- T. M. Smeeton, M. J. Kappers, J. S. Barnard, M. E. Vickers and C. J. Humphreys, (2003), Phs. Stat. sol.(b), 240, 297-300.
- 52- Mario Birkholz (2006) "Thin film analysis by X-ray scattering" WILEY – VCH Verlag and Co. KGaA, Weinheim, ISBN: 3-527-31052-5.
- 53- V. Y. Davydov, N. S. Averkiev, I. N. Goncharuk, D. K. Nelson, I. P. Nikitina, A. S. Polkovnikov A. N. Smirnov, M. A. Jacobson and A. F. Ioffe, (1997) "Raman and photoluminescence studies of biaxial strain in GaN epitaxial layers grown on 6H–SiC" J. Appl. Phys. 82, 5097-5112.
- 54- I. H. Lee, I. H. Choi, C. R. Lee and et all, (1998), J. Appl. Phys. 83, 5787-5791.
- 55- C. Kisielowski et al., (1996) Phys. Rev. B 54, 17745.
- 56- T. Kozawa, T. Kachi, H. Kano, H. Nagase, N. Koide and K. Manabe (1995), J. Appl. Phys. 77, 4389-4392.
- 57- K. Kim, W. R. Lambrecht, and B. Segal, (1994), Phys. Rev. B, 50, 1502.
- 58- A. Polin, M. Grimsdich, and I. Grzegory, (1996), J. Appl. Phys, 79.
- 59- G. H. Olsen and M. Ettenberg, (2000), J. Appl. Phys. Letter. 88, 2543-2547.
- 60- W. Reiger, T. Metzger, H. Angerer, R. Dimitrov, O. Ambacher, and M. Stutzmann, (1996) .

- 61- T. Takeuchi, H. Takeuchi, S. Sota, H. Sakai, H. Amano, I. Akasaki, (1997) "Quantum confined stark effect due to piezoelectric fields in GaInN strained Quantum wells " Jpn. J. Appl. Phys. **36**, L177.
- 62- F. Bernardini, V. Fiorentini, and D.Vanderbilt, (2001), Phys. Rev. **B**, 63, 193201.
- 63- V. Fiorentini; F. Bernardini; F. Della seala; A. Dicrlo; P. Lugli; (1999), J. Phys. Rev. B 60, No.12 ; P.8849
- 64- C. Wetzel, T Takeuchi, H Amano and I. Akasaki, (2000) "Spectroscopy in Polarized and Piezoelectric AlGaInN Heterostructures," MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **5S1**, W12.4.
- 65- C. G. Van de Walle, J. Neugebauer, (1997), Appl. Phys. Lett., **70**, 2577.
- 66- John H. Davies, (1998), The physics of low-dimensional semiconductors, Cambridge University Press, p. 258.
- 67- F. Long, W. E. Hagston, P. Harrison, T. Stirner, (1997), Jpn. J. Appl. Phys. **82**, 3414-3421.

مقالات مستخرج از رساله:

۱- مقاله ژورنالی: Physics Letters A 374 (2009) 66-69

" Theoretical Modeling for Quantum-Confined Stark Effect due to Internal Piezoelectric Fields in GaInN Strained Quantum Wells"

۲- مقاله ژورنالی: Chinese Journal of physics (2009)

" Thermal stress and strain in GaN epitaxial layer grown on sapphire substrate by MOCVD method"

۳- مقاله کنفرانسی :

شانزدهمین همایش بلورشناسی و کانی شناسی ایران (آبانماه ۱۳۸۷)- دانشگاه گیلان

"محاسبه بزرگی میدان الکتریکی داخلی کلی در ساختارهای ناهمگون $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ با

تبلور ورتسایت"

Thermal stress and strain in GaN epitaxial layer grown on sapphire substrate by MOCVD method

H. R. Alaei^{1,2,3}, H. Eshghi^{1,3}, R. Riedel⁴, D. Pavlidis,

¹ Department of Physics, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran.

² Department of Physics, Varamin Azad University, Varamin, Iran.

³ Department of Material Science, Darmstadt University of technology, Darmstadt, Germany.

⁴ Department of Microelectronic Engineering, Darmstadt University of technology, Darmstadt, Germany.

PACS 61.72.uj, 68.55.-a, 81.40.Jj, 33.20.Fb, 61.72.uj

Corresponding author: hr_alai@yahoo.com, Phone: +098 2733335270, Fax: +098 2733335270

Abstract

Here in this article we have studied the existence of stress and strain in a Si-doped GaN (2 μm)/sapphire structure grown by MOCVD method and tried to model these parameters. The presence of stress in our sample is supported by E_2 Raman shift mode ($\Delta\omega$) of about 1.25 cm^{-1} . To find the amount of biaxial basal plane stress we performed two techniques, XRD and film bending by profilometer. XRD technique confirmed that the GaN layer has a hexagonal structure with the lattice constants of $c = 5.1825 \text{ \AA}$ and $a = 3.187 \text{ \AA}$. Our theoretical calculations show this layer suffer a biaxial stress (σ_a) of about $0.175 \pm 0.003 \text{ GPa}$. The profilometer data analysis also lead to a compatible value of $0.12 \pm 0.04 \text{ GPa}$. These parameters altogether suggest the relation $\Delta\omega = 7.1 \pm 0.1 \sigma \text{ cm}^{-1}/\text{GPa}$ for this layer.

Keywords: Stress, Strain, Gallium nitride, lattice constants, Raman spectroscopy, film bending

I. Introduction

Gallium nitride (GaN) and related compounds have attracted considerable academic and commercial attention in recent years. These attentions mainly are due to their outstanding optoelectronic and electronic properties employed in numerous applications such as: (1) Optical Devices: Laser Diodes (LDs), ultra violet (UV) photodetectors and sensors also in Light Emitting Diodes (LEDs) which can cover continuously, by appropriate alloying, from 0.7 eV (the band gap of hexagonal InN) to 6.2 eV (the band gap of hexagonal AlN) [1-6]. (2) Electronic Devices: including those which can operate in hostile environmental conditions such as high temperature and high radiation and/or under extreme operating conditions such as high power and high frequency in the Metal-Insulator-Semiconductor Field Effect Transistors (MISFETs) and High Electron Mobility Transistors (HEMTs) [7-8].

Despite all the advantages in GaN material and GaN based devices, there remain unsolved problems about quality of these material during the growth process and stability of devices. Most of these problems are related to the lack of thermally and lattice mismatch between the epilayer and the substrate. This leads to a high interfacial strain and stress and therefore to large defect density in the GaN films [9].

There have been a considerable efforts directed toward the understanding of electrical and optical properties related to strain and stress in these materials. Even though the largest part of this stress seems to be relieved by generation of misfit dislocations, another stress contribution comes from the difference in thermal expansion coefficient between layers. The magnitude of residual stress in epitaxial layers is known to depend on the type of substrate, layer thickness of both buffer and epitaxial film, and the growth temperature [10].

Due to the fact that the thermal expansion coefficient of GaN is smaller than that of sapphire, the GaN epitaxial layers are compressed in the plane of the layers and sample bends to be convex on the GaN layer side when the temperature is reduced from the growth temperature to room temperature [11-13]. Here in this article we would like to investigate the presence of this strain and stress in the GaN layer and by modelling the data evaluate these parameters, quantitatively.

II. Experiment:

The Si-doped GaN sample studied in this work was grown by metal-organic chemical vapour deposition (MOCVD) reactor on c-plane sapphire substrate. The substrate was first cleaned with solvents and subjected to and *in situ* pre-treatment in flowing H₂ at 1030 °C for 3 minutes. The particular structure under discussion has a 0.5 μm thick GaN buffer layer, directly grown on sapphire, followed by a 1.5 μm GaN layer. A schematic diagram and scanning electron microscope (SEM) of this structure is shown in Fig. 1 (a) and (b).

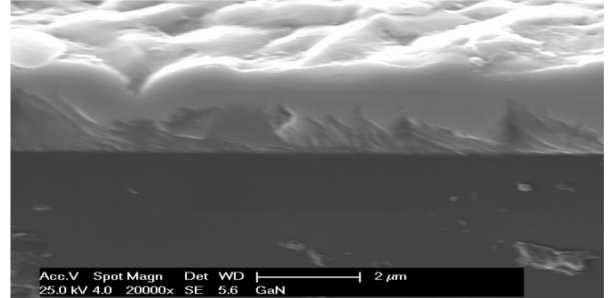
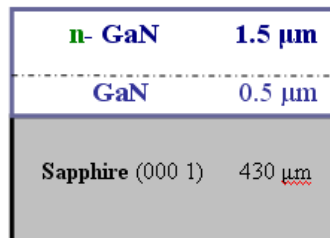


Figure 1. (a) The schematic diagram of sample structure. (b) The SEM photograph of the sample.

Trimethylgallium (TMG) and ammonia (NH₃) was used as sources for Ga and N, respectively. Hydrogen (H₂) was used as carrier gas, and a dilute mixture of disilane in H₂ was used to effect silicon (Si) doping on the GaN film. X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) showed a relatively good elemental composition levels for Ga (% 53) and N (% 47) in this layer, Fig. 2.

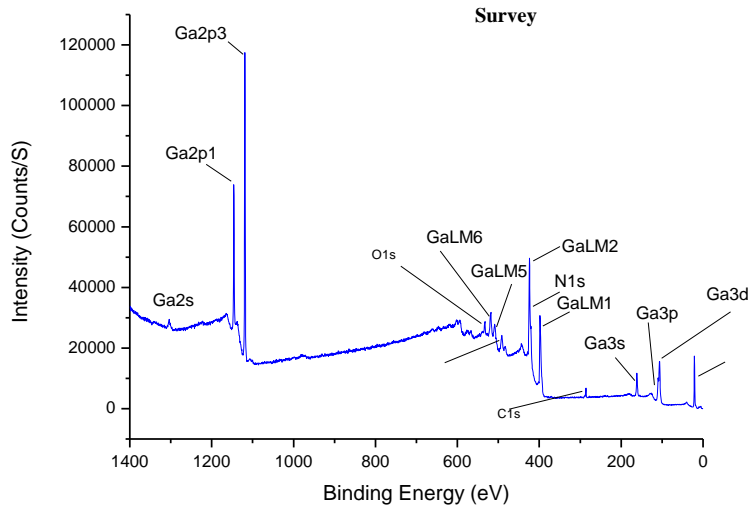


Figure 2. The XPS spectrum of the sample.

In addition we used the Raman scattering technique at room temperature with an Ar^+ ion laser ($\lambda=514$ nm) as the source of excitation along [0001] direction. The scattered radiation was dispersed using a double monochromator connected to a computer controlled system for scanning and data acquisition. Also we used a combined utilization of X-Ray Diffraction (XRD) by Siemens- D500 machine for determination of crystal structure and an advanced profilometer for measuring the radius of curvature of the layer due to thermal biaxial basal plane stress.

III. Result and Discussion:

Raman scattering measurement

Due to the fact that the E_2 Raman mode can be affected mainly by the stress in the layer [14], we performed this measurement to find out about this quantity in our grown GaN layer, Fig. 3. As it is known the Raman active phonon modes are two nonpolar E_2 phonons and two polar modes: A_1 and E_1 , which are split into longitudinal optical (LO) and transverse optical (TO) components by the long range electric field. According to this figure the 569.25 and 734 cm^{-1} positions are related to E_2^H and A_1 (LO) GaN modes, and 418 and 751 cm^{-1} positions are belong to A_{1g} and E_{1g} modes in sapphire, respectively. The biaxial strain in the c -plane of the GaN layer is most easily probed by observing E_2^H Raman shift, the strongest signal in the spectrum at 569.25 cm^{-1} , compare to its bulk value (568 cm^{-1} [15, 16]) it is about $\Delta\omega = 1.25$ cm^{-1} . This is a clear evidence for the presence of stress in our sample. In the following we have tried to calculate this quantity by two experimental methods, (1) XRD, and (2) film bending measurements.

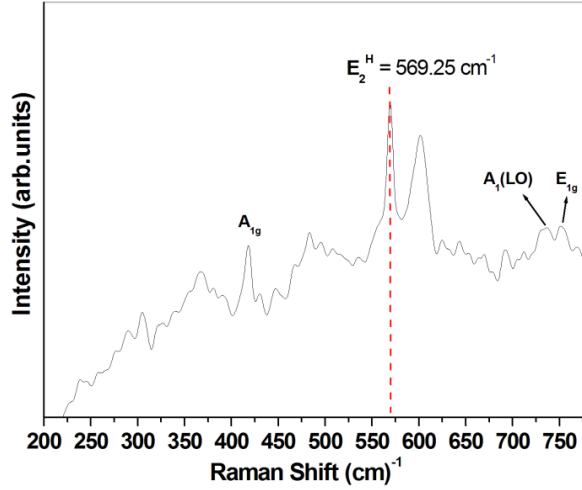


Figure 3. The Raman spectrum of the sample. The peak position related to E_2^H mode in this sample is shown by the dotted line (see the text).

1) Crystal structure and stress - strain determination using XRD measurement

In order to calculate the magnitude of stress in our sample we need to know about the structure and the lattice constants of our GaN layer. XRD spectroscopy is a powerful method for this purpose. Fig. 4 shows the corresponding spectrum for this sample. As it is clear there are two intensive peaks at 34.62° and 72.93° due to (0002) and (0004) planes and a weak one at 32.41° for (1000) plane, respectively. As it is known these are the characteristic crystal planes for a hexagonal structure. Now using these experimental evidences together with the relation:

$$\frac{2 \sin \theta}{\lambda} = \sqrt{\frac{4h^2 + hk + k^2}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2}} \quad (1)$$

in hexagonal phase structures [17], we found $c = 5.1825 \text{ \AA}$ and $a = 3.187 \text{ \AA}$ in this sample. A comparison between these values with those of bulk unstrained GaN ($c = 5.185 \text{ \AA}$ and $a = 3.189 \text{ \AA}$) [18], show this layer suffers a biaxial compressive strain. These results can be used to determine the basal plane strain and stress in this layer. According to Kisielowski et al report [19]:

$$\varepsilon_a = E^{-1} \sigma_a (1 - \nu) \quad , \quad (2)$$

$$\varepsilon_c = -E^{-1} \sigma_a 2\nu \quad , \quad (3)$$

$$\varepsilon_c / \varepsilon_a = -2\nu / (1 - \nu) \quad (4)$$

where ε_a and ε_c are the common strains for in-plane ($\Delta a/a_0$) and in c-direction ($\Delta c/c_0$), ν is the Poisson ratio and E is the Young modulus for GaN (=196 GPa [20]). From eqs. (2) and (3) it is easy to see that the measured lattice constants a and c are related to the Poisson ratio by:

$$(\Delta c/c_0) / (\Delta a/a_0) = \varepsilon_c / \varepsilon_a = -2\nu / (1 - \nu) = 0.769 \quad (5)$$

in our sample. Therefore $\nu = 0.28$, which is consistent within the range of other reported values of 0.26 [21] and 0.24 [22]. Now using eqs (2) and (3) the biaxial basal plane stress (σ_a) in this sample is about 0.175 ± 0.003 GPa.

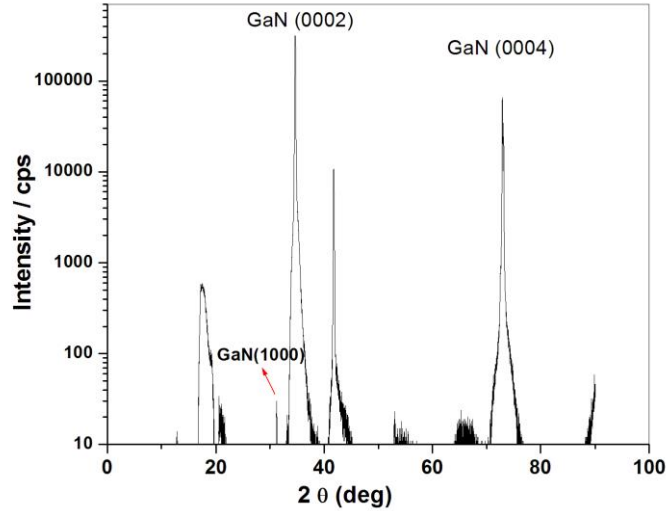


Figure 4. Theteta-2 Theteta scan in XRD spectroscopy. The peak position of the characteristic planes in GaN layer.

2) Biaxial stress determination by measuring the sample curvature

A useful method for determination of stress and strain in a layer grown on a substrate with different thermal expansion coefficients is to measure the curvature of the layer by surface profilometer. To find these quantities we have followed the following procedure given by Olsen and Ettenberg [12].

At equilibrium conditions when stress is caused only by internal forces then based on fundamental rules we have:

$$\begin{cases} \sum_i F_i = 0 \\ \sum_i M_i = 0 \end{cases} \quad (6)$$

where F_i and M_i are bending forces and moments in i th layer, respectively. These are shown schematically in Fig. 5.

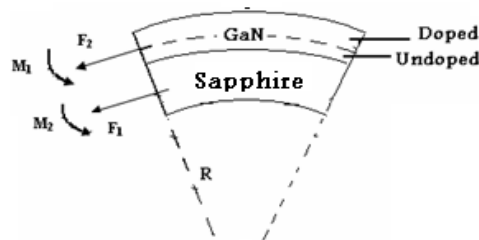


Figure 5. Sketch of a bent two-layer composite. The radius of curvature (R), Force (F_i) and the moment (M_i) are all drawn in the positive sense.

The total strain and moment in a square shape N -layer composite can be given by:

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^{N-1} \left(\varepsilon_i - \varepsilon_{i+1} = \frac{F_{i+1}}{E_{i+1}wt_{i+1}} - \frac{F_i}{E_iwt_i} - \frac{t_i + t_{i+1}}{2R} \right) \quad (7)$$

$$M = \sum_{i=1}^N \left(\frac{E_i t_i^3 w}{12R} + F_i \sum_{j=1}^i \left(t_j - \frac{t_i}{2} \right) \right) \quad (8)$$

where t , w , E and R are the thickness, width, Young modulus and the radius of curvature of layers. In our interested system that contains two layers (GaN+sapphire), $N = 2$, therefore eq. (7) reduces to:

$$\varepsilon = \frac{1}{6R} \frac{E_1 t_1^3 + E_2 t_2^3}{t_1} \left(\frac{1}{E_1 t_1} + \frac{1}{E_2 t_2} \right) + \frac{t_1 + t_2}{2R} \quad (9)$$

In this equation indices 1 and 2 refer to sapphire and GaN layer, respectively. Here $t_1 = 430$ and $t_2 = 2 \mu\text{m}$ also $E_1 = 425$ and $E_2 = 196$ GPa [20]. In order to know about the radius of curvature, R , we have used the profilometer data, Fig. 6. According to these data $R = 0.86$ m.

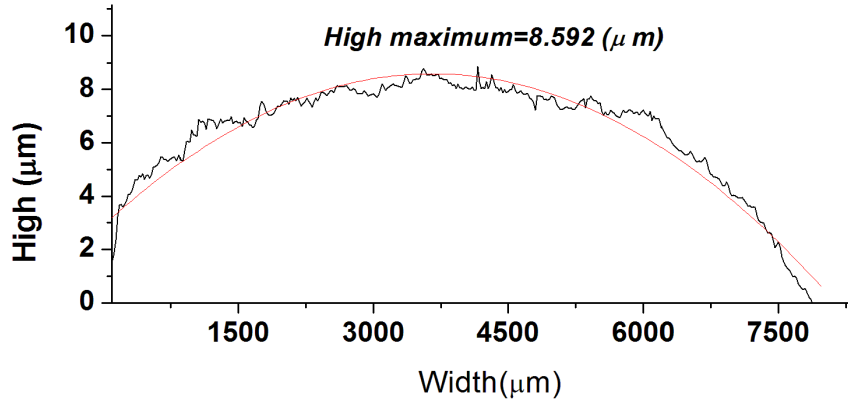


Figure 6. The vertical profile of GaN surface layer. As it is evident through a width of about 8 mm the convex has a height of 8.592 μm . The smooth curve is an average fit to the measured data given by profilometer.

Using these parameters in eq. (9) we found $\varepsilon_c = 3.345 \times 10^{-4}$, and together with eq. (3) the compressive stress in our sample is about 0.12 ± 0.04 GPa. It seems this result is quit compatible with the value derived by XRD measurement. Due to the higher precision result using XRD technique for the existed stress in GaN layer (0.175 ± 0.003 GPa) compare with the profilometer data and considering the E_2^H Raman shift suggest the relation $\Delta\omega = 7.1 \pm 0.1 \sigma \text{ cm}^{-1}/\text{GPa}$. This relation seems reasonable compared with other reports. Rieger et al [23] has reported $\Delta\omega = 7.9 \sigma$ for thin (750 nm) GaN films deposited on AlN buffer layer grown by MOCVD method, and Kozawa et al [20] reported $\Delta\omega = 6.2 \sigma$ for the GaN samples (2.5-50 μm) with AlN buffer layer grown by MOVPE method, also Kisielowski et al [19] suggested $\Delta\omega = 4.2 \pm 0.3 \sigma$ for GaN films (0.5–5.0 μm) grown by MBE method.

Conclusion:

In summary, we have investigated the existence of the stress and strain in Si-doped GaN layer (2 μm thick) grown on sapphire by MOCVD method and tried to evaluate these quantities. XPS measurements indicate a relatively good stoichiometry elemental composition levels for Ga (%53) and N (%47) in GaN layer. The presence of stress in our sample is supported by E_2 Raman shift mode of about 1.25 cm^{-1} . To find the amount of biaxial basal plane stress we performed two techniques, XRD and film bending by profilometer. XRD technique showed the GaN layer has a hexagonal structure with the lattice constants of $c = 5.1825\text{ \AA}$ and $a = 3.187\text{ \AA}$. Our calculations based on theoretical models show this layer suffer a biaxial stress (σ_a) of about $0.175 \pm 0.003\text{ GPa}$. The profilometer data analyses also lead to a compatible value of $0.12 \pm 0.04\text{ GPa}$. These parameters altogether suggest the relation $\Delta\omega = 7.1 \pm 0.1\sigma\text{ cm}^{-1}/\text{GPa}$ for this layer.

Acknowledgment:

We honorably appreciate of some peoples from Department of Material Science in Darmstadt University of thechnology who helped us a lot for sample preparation and charactrization. Carmen Zevoriste, Alireza Barati Alexander Bukove and Malin chao are some of peoples who helped us in this duration and we retain their name for ever.

References:

- [1] S. K. Nakamura, Solid State Common. **102**, 237 (1997).
- [2] H. Song and S. Lee, Nanotechnology **18**, 255202 (2007).
- [3] J. Songa, W. Lua, J. S. Flynnb and George R. Brandes Solid-State Electronics, **49**, 1330-1334 (2005).
- [4] X.H. Ji , S.P. Lau , H.Y. Yang , Q.Y. Zhang, Thin Solid Films **515** 4619–4623 (2007).
- [5] V. Yu. Davydov, A. A. Klochikhin , V. V. Emtsev ,D. A. Kurdyukov , S. V. Ivanov, V. A. Vekshin. Bechstedt ,J. Furthmu"ller , J. Aderhold , J. Graul , A. V. Mudryi ,H. Harima , A. Hashimoto , A. Yamamoto , and E. E. Haller., phys. stat. sol. (b) **234**, No. 3, 787–795 (2002).
- [6] L. M. Lin and P. T. Lai, Journal of Electrochemical Society, **154** (3) G58-G62 (2007).
- [7] A. Dadgar, M. Neuburger, F. Schulze, and et. all, Phys. Stat. Sol. (a) **202**. No. 5, 832-836 (2005).
- [8] Y. Cao and D. Jena, Appl. Phys. Letter. **90**. 182112(2007).
- [9] J. Cao, D. Pavlidis, A. Eisenbach, A. Philippe, C. Bru-Chevallier, and G. Guillot, Appl. Phys. Lett., Vol. **71**, No. 26, (1997).
- [10] J. M. Wagner and F. Bechstedt, Physcal. Review B. **66**, 115202 (2002).
- [11] J. Yu, J. G. Kim, J. O. Chung and D. H. Cho, J. Appl. Phys. Letter. **88**, 1688-1694 (2000).
- [12] G. H. Olsen and M. Eittenberg, J. Appl. Phys. Letter. **88**, 2543-2547 (2000).
- [13] K. Roll, J. Appl. Phys. Letter. **47**, 3224-3229 (1967).
- [14] P. Perlin, I. Grzegory and A. Polian, Physcal. Review B. **45**, 83-89 (1992).
- [15] I. H. Lee, I. H. Choi , C. R. Lee and et all, J. Appl. Phys. **83**, 5787-5791 (1998).
- [16] H. Harima, J. Phys.: Condens. Matter, **14**, R967–R993, (2002).
- [17]M. Birkholz, Thin film Analysis by X-Ray Scattering, WILEY-VCH Verlag Gmbh (2006).
- [18] V. Y. Davydov, N. S. Averkiev, I. N. Goncharuk, D. K. Nelson, I. P. Nikitina,A. S. Polkovnikov, A. N. Smirnov, M. A. Jacobson and A. F. Ioffe, J. Appl. Phys. **82**, 5097-5112 (1997).
- [19] C. Kisielowski et al., Phys. Rev. B **54**, 17745 (1996).
- [20] T. Kozawa, T. Kachi, H. Kano, H. Nagase, N. Koide and K. Manabe J. Appl. Phys. **77**, 4389- 4392 (1995).
- [21] K. Kim, W. R. Lambrecht, and B. Segal, Phys. Rev. B **50**, 1502 (1994).
- [22] A. Polin, M. Grimsdich, and I. Grzegory, J. Appl. Phys. **79**, 3343 (1996).
- [23] W. Reiger, T. Metzger, H. Angerer, R. Dimitrov, O. Ambacer, and M. Stutzmann, Appl. Phys. Lett. **68**, 970 (1996).

محاسبه بزرگی میدان الکتریکی داخلی کلی در ساختارهای ناهمگون GaN/In_xGa_{1-x}N با تبلور ورتسایت

علائی حمید رضا^۱، عشقی حسین^۱

^۱دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود. hr_alai@yahoo.com

^۱دانشکده فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد ورامین، ورامین

چکیده

در ساختارهای چند لایه ای از نیمرساناها کرنشهای درونی ساختار که غالباً در سطح مشترک لایه ها تولید می شوند دارای آثار پیزوالکتریکی هستند. در این ساختارها به سبب ناهمسانگردی بلور و نیز ناهمسانگردی نیروهای ناشی از کرنش که بلور را تحت تاثیر قرار می دهند، هم کرنش وهم پیزوالکتریک هر کدام بصورت یک تانسور ظاهر می شوند. ما در این مقاله ابتدا بردار قطبش الکتریکی را از حاصلضرب این دو تانسور بدست آورده سپس میدان پیزوالکتریکی را بر حسب تغییرات کسر مولی ایندیم در ساختار چاههای کوانتومی چندگانه GaN/In_xGa_{1-x}N محاسبه نمودیم. در ساختارهای بلوری ورتسایت این نیمرساناها علاوه بر میدان پیزوالکتریکی میدان الکتریکی دیگری نیز بطور ذاتی وجود دارد که به میدان خودبخودی موسوم است. این میدان بنا بر شرایط رشد میتواند همسو یا ناهمسو با میدان پیزوالکتریکی باشد. ما همچنین میدان الکتریکی کل را که برآیند این دو میدان است برای یک نوع از این ساختارها محاسبه نموده ایم.

مقدمه

نیمرساناهای نیتروژندار بطور طبیعی در ساختار ورتسایت متبلور می شوند. در این ساختارها به علت تقارن بلوری نسبتاً ضعیف، مراکز بارهای مثبت و منفی بر هم منطبق نبوده که نتیجه آن بوجود آمدن یک میدان الکتریکی داخلی خودبخودی در بلور می باشد [۱ و ۲]. علاوه بر میدان الکتریکی خودبخودی چنانچه نیمرساناهای نیتروژندار بمنظور ساخت قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی در ساختارهای ناهمگون مورد استفاده قرار گیرند کرنشهای درون ساختاری (کرنشهای درونی بین لایه های مجاور، ناشی از نابرابری ثابت شبکه این لایه ها و نیز نابرابری ضریب انبساط گرمائی آنها) به تشکیل بارهای قطبشی در سطح مشترک لایه ها منجر می شود، که خود سبب تولید میدان الکتریکی دیگری در ماده می شود که به میدان پیزوالکتریک معروف است.

میدان الکتریکی کل که برآیند این میدانها می باشد سبب اثرات نامطلوبی همچون کاهش راندمان اپتیکی و انتقال بسوی قرمز در طیف تابش گسیلی قطعات متشکل از این نیمرساناها می گردد که این اثر به اثر حبس کوانتومی استارک (QCSE) معروف است [۳ و ۴].

اما سایر ویژگیهای منحصر بفرد نیمرساناهای نیتروژندار از جمله پایداری آنها در دماهای بالا و در شرایط شیمیایی مختلف و نیز برخورداری از گاف نواری مستقیم و عریضی که می تواند گستره طیفی فرورسرخ تا فرابنفش را پوشش دهد سبب شده از این مواد بطور گسترده در ساخت قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی همانند دیودهای نوری و لیزری و ترانزیستورهای با توان بالا استفاده شود البته بموازات آن تلاشهای گسترده ای نیز بمنظور ارتقای کیفیت و کاهش میزان اثر عوامل نامطلوب همانند اثرات میدانهای الکتریکی داخلی در حال انجام است. در همین راستا در سالیان اخیر تحقیقات برای دستیابی به روشهای پایدار برای حذف یا کاهش اثر میدانهای الکتریکی داخلی در این نیمرساناها مورد توجه خاص قرار گرفته است [۵ و ۶ و ۷ و ۸].

محاسبات نظری:

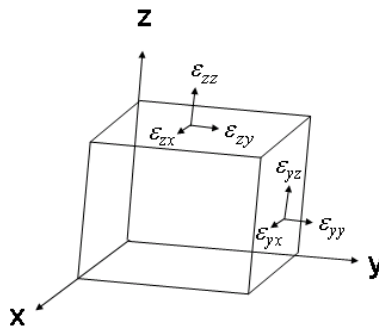
الف (محاسبه قطبش پیزوالکتریکی

برای محاسبه بزرگی مولفه های میدان قطبش پیزوالکتریکی در ساختار چاه کوانتومی چندگانه $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ باید تانسور پیزوالکتریک را در بردار کرنش ضرب کرد.

$$P_i = \sum_j e_{ij} \varepsilon_j$$

$$\begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} & e_{14} & e_{15} & e_{16} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} & e_{24} & e_{25} & e_{26} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & e_{34} & e_{35} & e_{36} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (1)$$

بخاطر ناهمسانگردی در بلور، کرنش تانسوری از مرتبه یک است در حالی که تانسور پیزوالکتریک از مرتبه دوم میباشد. در شکل زیر تعدادی از عناصر تانسور کرنش به نمایش گذاشته شده اند



شکل ۱: نمایش تعدادی از عناصر تانسور کرنش

البته بنا بر شرایط رشد و تقارنهایی که در ساختار وجود دارد بعضی از عناصر این تانسورها برابر با صفر و بعضی نیز با هم برابر می باشند. در این خصوص میتوان به موارد زیر اشاره نمود:

(۱) در چنین ساختارهایی که عموماً در جهت (0001) رشد داده می شوند لایه های InGaN تحت تاثیر یک کرنش دو محوری عمود بر راستای (0001) قرار دارند اما در جهت رشد بلور این لایه ها بدون تنش هستند زیرا در این جهت نیروئی به بلور وارد نمی شود و به همین دلیل سه مولفه آخر بردار کرنش برابر با صفر و سه مولفه اول غیر صفر می باشند. مولفه های غیر صفر بردار کرنش در یک ساختار چاه کوانتومی $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ را میتوان بنا بر تعریف کرنش از روابط زیر بدست آورد:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_s} = \frac{3.189 - [3.189(1-x) + 3.548x]}{[3.189(1-x) + 3.548x]} = \frac{-0.359x}{3.189 + 0.359x}$$

$$\varepsilon_{zz} = -\frac{2C_{13}}{C_{33}} \cdot \varepsilon_{xx} = -0.598 \left(\frac{-0.359x}{3.189 + 0.359x} \right) \quad (2)$$

در روابط بالا a_s و a_e به ترتیب ثابت شبکه لایه InGaN , GaN و C_{ij} ها ثابت سختی کشسانی (elastic stiffness constant) برای لایه InGaN میباشد که مقادیر عددی آنها از مرجع [۹] برگزیده شده اند.

ضمناً در این محاسبات برای محاسبه ثابت شبکه لایه $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ از قانون وگارد استفاده شده است.

(۲) در بلورهای شش گوشه گروه تقارنی C_{6v} بنا بر روابط تقارنی بین عناصر تانسور پیزوالکتریک داریم:

بجز این پنج عنصر بقیه عناصر این تانسور برابر با صفر هستند. $e_{31} = e_{32}, e_{15} = e_{24}, e_{33} \neq 0$. [۶ و ۱].
 با جایگذاری عناصر تانسوری در رابطه (۱) این رابطه به شکل زیر در خواهد آمد:

$$\begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -0.22 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.22 & 0 & 0 \\ -0.22 & -0.22 & 0.43 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{-0.359x}{3.189+0.359x} \\ \frac{-0.359x}{3.189+0.359x} \\ -0.598 \left(\frac{-0.359x}{3.189+0.359x} \right) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (۳)$$

که نتیجتاً خواهیم داشت:

$$P_z = \frac{0.25034x}{3.189+0.359x} \quad \text{و} \quad P_x = P_y = 0 \quad (۴)$$

و میدان پیزوالکتریکی حاصله را با تاثیر ثابت دی الکتریک ماده میتوان محاسبه نمود. بزرگی این میدان بر حسب کسر مولی ایندیم در ساختار $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ از رابطه: $E_z(x) = \frac{P_z}{K \epsilon_0}$ بدست می آید که ثابت دی الکتریک برای لایه InGaN در حدود $10/4$ در نظر گرفته شده است [۹ و ۶].

ب) محاسبه قطبش خود بخودی

بزرگی قطبش خود به خودی از قانونی شبیه به قانون وگارد برای آلیاژهای سه تایی و چهارتایی به دست آید.

برای مثال در مورد آلیاژهای $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{(1-x-y)}\text{N}$ قطبش خود به خودی از رابطه زیر به دست می آید [۴ و ۷ و ۶].

$$P_{\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{(1-x-y)}\text{N}}^{Sp} = xP_{\text{AlN}}^{(Sp)} + yP_{\text{InN}}^{(Sp)} + (1-x-y)P_{\text{GaN}}^{(Sp)} \quad (۵)$$

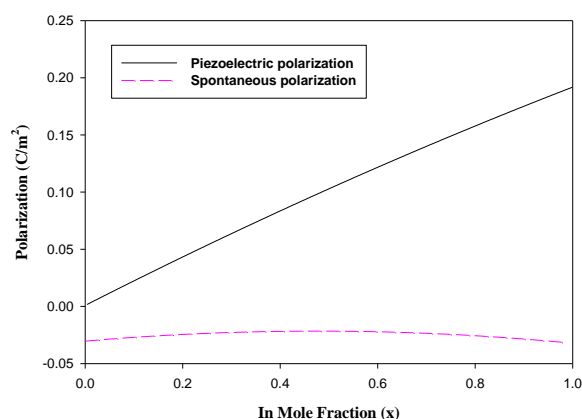
برای استفاده از این رابطه لازم است که بزرگی قطبش خودبخودی برای ترکیبات دوگانه در دسترس باشند. مقادیر قطبش خود بخودی و پیزوالکتریک برای ترکیبات دوتائی تری نیترایدها همراه با بعضی از ضرایب مهم با استفاده از مرجع [۱] در جدول زیر آورده شده اند.

	a (Wz) (°A)	P_{SP} (C/m ²)	e_{33} (C/m ²)	e_{31} (C/m ²)	C_{33} (GPa)	C_{33} (GPa)
GaN	۳/۱۸۹	-۰/۰۲۹	۰/۶۵	-۰/۰۳۴	۳۷۰	۳۵۴
InN	۳/۵۴۴	-۰/۰۳۲	۰/۸۱	-۰/۰۴۱	۲۲۳	۲۰۴

با استفاده از این داده ها تغییرات قطبش خودبخودی برای ترکیب $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ بر حسب کسر مولی ایندیم (x) را میتوان از رابطه:

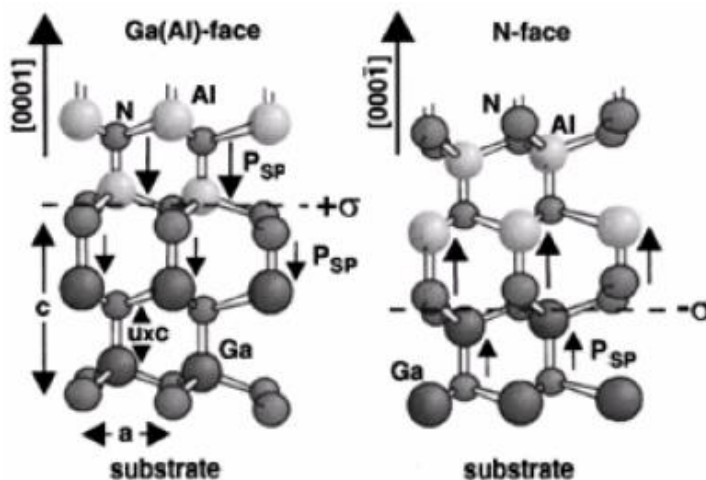
$$P_{SP}(x) = x(-0.032) + (1-x)(-0.029) + bx(1-x) \quad (۶)$$

محاسبه نمود که b (پارامتر خمشی) را برای ترکیب مورد نظر $0/۰۳۷$ در نظر گرفته ایم [۹]. در شکل زیر تغییرات قطبش خودبخودی و قطبش پیزوالکتریک بر حسب کسر مولی ایندیم ترسیم شده اند.



شکل ۲: نمودار تغییرات قطبش خودبخودی و قطبش پیزوالکتریک بر حسب تغییرات کسر مولی ایندیم برای ترکیب $In_xGa_{1-x}N$

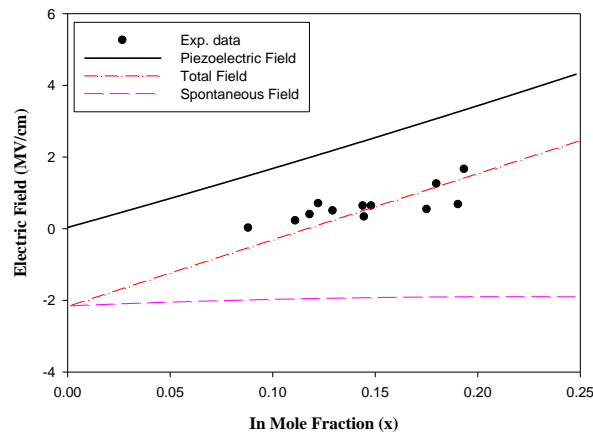
نکته مهم دیگری که در این جا بایستی به آن اشاره کنیم این است که قطبش با پلاریتی کریستال ارتباط مستقیم دارد. یعنی بسته به اینکه با حرکت در امتداد محور C (جهت رشد)، پیوندها از کاتیون به سمت آنیون باشد یا از آنیون به سمت کاتیون جهت قطبش فرق خواهد کرد. در ترکیبات نیتروژندار وقتی که پیوندها در امتداد محور C از اتم کاتیون (مثلا اتم Ga) به سمت اتم آنیون (N) باشد، به این نوع پلاریتی، پلاریتی گالیم (Ga) گویند ولی اگر پیوندها در امتداد محور C از اتم آنیون (N) به سمت اتم کاتیون (Ga) باشد، به این پلاریتی، پلاریتی نیتروژن (N) گویند. در حالت اول سطح لایه یعنی بالاترین صفحه بلوری موازی با صفحه (001) با اتمهای Ga پوشیده خواهد شد که نمونه را اصطلاحاً Ga-face گویند و در حالت دوم سطح لایه با اتمهای N پوشیده می شود که نمونه را N-face گویند. در حالت اول جهت میدان قطبش خودبخودی (PSP) مخالف جهت رشد است ولی در حالت دوم موافق جهت رشد میباشد که طرحواره آنها در شکل زیر به نمایش گذاشته شده است.



شکل ۳: نمودار شماتیک دو ساختار بلوری ورتسایت Ga-face و N-face

ج) محاسبه بردار قطبش کل و میدان الکتریکی کلی

بردار قطبش کلی بصورت: $\vec{P}_{total} = \vec{P}_{pz} + \vec{P}_{sp}$ تعریف می شود. بنابراین جهت دوگانه ای که \vec{P}_{pz} (برحسب نوع کرنش) می تواند داشته باشد و نیز جهت دوگانه ای که \vec{P}_{sp} (برحسب نوع پلاریتی بلور) میتواند داشته باشد اندازه بردار قطبش کلی از جمع یا تفاضل اندازه این دو بردار بدست می آید. ما تغییرات میدان الکتریکی کل و مولفه های سازنده آن را برای یک نمونه خاص محاسبه و نمودار آنها را در شکل زیر ترسیم نمودیم. محاسبات انجام شده نشان دادند که در این نمونه میدانهای قطبشی و پیزوالکتریک مخالف جهت هستند.



شکل ۳: نمودار تغییرات میدان الکتریکی کل و مولفه های سازنده آن بر حسب تغییرات کسر مولی ایندیم

نتیجه گیری

در ساختارهای ناهمگون اختلاف ثابت شبکه لایه های رشد یافته بر روی یکدیگر عامل اصلی کرنش در سطح مشترک آنها می باشد و یکی از اثرات مهم کرنش، ایجاد میدان پیزوالکتریکی در لایه چاه کوانتومی می باشد. نتیجه محاسبات نشان میدهند که در ساختار چند لایه ای $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ اختلاف ثابت شبکه لایه های رشد یافته با کسر مولی ایندیم رابطه ای خطی دارد در حالی که میدان پیزوالکتریکی مربوطه با کسر مولی ایندیم بصورت غیر خطی تغییر می نماید.

مرجع ها

- 1 - F. Bernardini, V. Fiorentini, and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B 63, 193201 (2001).
- 2 - S. Nakamura and G. Fasol; The Blue Laser Diode: GaN Based Light Emitters and Lasers (Springer-Verlag, Berlin, (1997).
- 3 - J. H. Davies; the "Physics of Low-Dimensional Semiconductors"; Cambridge University Press (1998).
- 4 - "Low-Dimensional Nitride Semiconductors", edited by B. Gil, Oxford University Press, pp.237(2002).
- 5 - F. Della Sala; A. Di Carlo; P. Lugli; V. Fiorentini and F. Bernardini; J. Appl. Phys. Lett. 76, 3950 (2000).
- 6 - V. Fiorentini; F. Bernardini; F. Della seala; A. DiCarlo; P. Lugli; J. Phys. Rev. B 60, No.12 ; P.8849,(1999).

- 7 - A. Chakraborty, S. Keller, C. Meier, B. A.Haskell, P. Waltereit, S. P. Denbaars, S. Nakamura, J. S. Speck and U. K. Mishra, Appl.Phys. Lett. **86**, 031901 (2005).
- 8 - T. Wunderer, P. Bruckner, B. Neubert, and K.Thonke, Appl. Phys. Lett **89**, 041121 (2006)
- 9 - H. Morkoc : Nitride Semiconductors and devices, Springer. Verlage, (1999)
- 10 - O. Ambacher; B. Foutz; J. Smart; J. R.Shealy; N. G. Weimann; K. Chu; M. Murphy; A.J. Sierakowski; W. J. Schaff; L. F. Eastman; R.Dimitrov; A. Mitchell and M. Stutzmann; J.pl.Phys. **87**, 334 (2000)

Abstract:

The presence of huge internal electric fields in nitride semiconductors causes for reduction in the efficiency of related electronics and optoelectronics devices. In this thesis we have tried to explain this effect in more details through two parts: experimentally and theoretically.

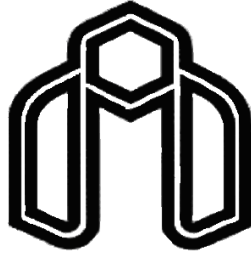
In the experimental part we have studied the existence of stress and strain in a Si-doped GaN ($2\ \mu\text{m}$)/sapphire structure grown by MOCVD method and tried to model these parameters. The presence of stress in our sample supported by E_2 Raman shift mode ($\Delta\omega$) is about $1.25\ \text{cm}^{-1}$. To find the amount of biaxial basal plane stress we performed two techniques, XRD and film bending by profilometer. XRD technique confirmed that the GaN layer has a hexagonal structure with the lattice constants of $c = 5.1825\ \text{\AA}$ and $a = 3.187\ \text{\AA}$. Our theoretical calculations show this layer suffer a biaxial stress (σ_a) of about 0.175 ± 0.003 . The profilometer data analyses also lead to a compatible value of $0.12 \pm 0.04\ \text{GPa}$. These parameters altogether suggest the relation $\Delta\omega = 7.1 \pm 0.1\sigma\ \text{cm}^{-1}/\text{GPa}$ for this layer.

In theoretical part firstly we have evaluated compressive strain in GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ interface and related piezoelectric polarization and field by changing indium mole fraction (x). Our calculations indicates that the piezoelectric field in such system increases to $4\ \text{MV/cm}$ for $x=0.25$. A theoretical analysis showed that using this model and including the effect of intrinsic spontaneous field, originating from weak crystal symmetry in wurtzite structures, successfully explains the experimental data reported for the amount of total electric fields in GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ /GaN single quantum well samples.

It is well-known that the presence of such internal fields lead to undesirable properties of Quantum Confined Stark Effect (QCSE), one of the main reasons in limiting the efficiency of light emitting devices based on nitride semiconductor nanostructures. In fact this effect causes a reduction in the intensity as well as a red shift in the peak position of luminescence spectrum in such devices. In the second theoretical part we determined the well width (z) dependent effect on red shifted quantum-confined Stark effect (QCSE) in GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x=0.13$) strained quantum well structures. To explain the corresponding reported data we used a perturbation model to a finite well system in order to find the carriers wave functions as well as their corresponding energy levels. Through this approach we found the first perturbation term ($\Delta E^{(1)}$) vanishes and

considering the second term ($\Delta E^{(2)}$) can successfully explain the photoluminescence (PL) peak energy position in such systems. Our analysis also showed that using a variable carrier well-width effective mass dependent, $m^*(z)$, for electrons and holes fits much more accurately to the experimental data than a constant effective mass, m^* .

Key words: nitride semiconductors, internal electric fields, stress, strain, Quantum Confined Stark Effect.



Shahrood University of Technology

Physics department

PhD Thesis

Title:

**Investigation of processes limiting the efficiency of light emitting
devices based on nitride semiconductor nanostructures**

By:

Hamidreza Alaei

Supervisor:

Dr. Hosein Eshghi

Date:

January 2010