

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



عنوان سمینار

انتشار اکسیتونی در چاه های کوانتومی مبتنی بر ساختار نامتجانس AlGaAs/GaAs

سمینار درس

الکترونیک کوانتومی

استاد مربوطه

دکتر شهرام محمد نژاد

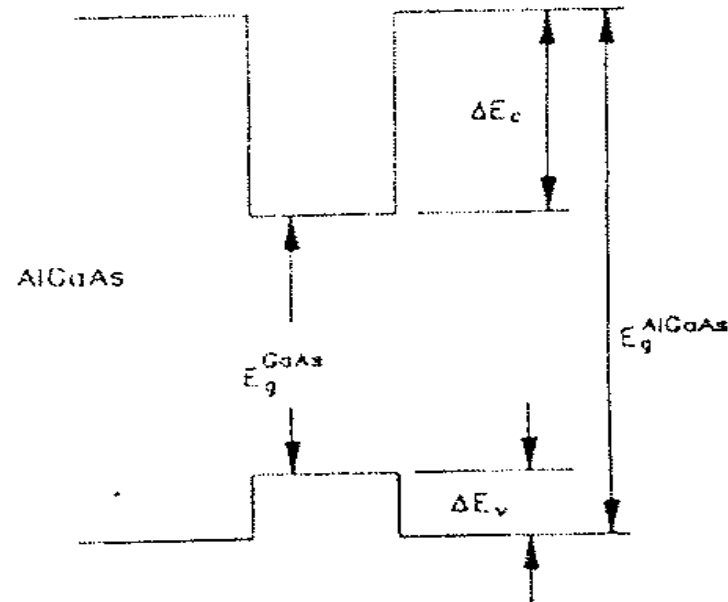
۱. Quantum Well ها
۲. ساختار نواری GaAs
۳. قضیه Bloch
۴. رفتار اکسیتون در حضور میدان مغناطیسی یکنواخت در حد دو و سه بعدی
۷. بررسی مقاله
۷. جمع بندی



در صورتیکه درجات آزادی حرکت حامل ها را محدود کنیم ساختارهای کوانتومی محبوس شده ایجاد می گردد . علت اینکه به این ساختارها ، ساختارهای کوانتومی میگویند این است که محدودیت حرکت در فاصله در حد چند ده آنگستروم سبب بروز خواص کوانتومی برای حامل ها می شود. در صورتیکه محبوس سازی در يك بعد انجام شود ذره در دو بعد دارای طیف پیوسته انرژی میباشد و در يك بعد بر روی ترازهای گسسته حرکت کند به این ساختار چاه کوانتومی گفته می شود . اگر محبوس سازی را در دو بعد انجام دهیم سیم کوانتومی و اگر در سه بعد انجام گیرد نقطه کوانتومی گفته میشود . برای ساخت چاه کوانتومی نیاز به دو ماده با گاف نواری مختلف داریم اگر ماده با گاف نواری کمتر بین مواد با گاف نواری بزرگتر ساندویچ شود به ماده با گاف نواری کوچکتر چاه و به ماده با گاف نواری بزرگتر سد گفته می شود . ذراتی که در ساختار قرار دارند به شکل طبیعی تمایل دارند تا در جایگاهی قرار گیرند که پایدارتر باشد و از سطح انرژی پایینی برخوردار باشد از این رو در درون چاه قرار می گیرند.

Quantum Well ها

ΔE_c جدانشدگی نوار یا به بیان دیگر اختلاف انرژی سد و چاه در نوار رسانش و نیز ΔE_v جدانشدگی نوار ظرفیت یا اختلاف انرژی سد و چاه در نوار ظرفیت است.



شکل بالا ساختار چاه کوانتومی یکتایی است اگر چندین شکل از آنها را در کنار هم قرار دهیم یک ساختار چاه کوانتومی چند تایی خواهیم داشت.

Quantum Well ها

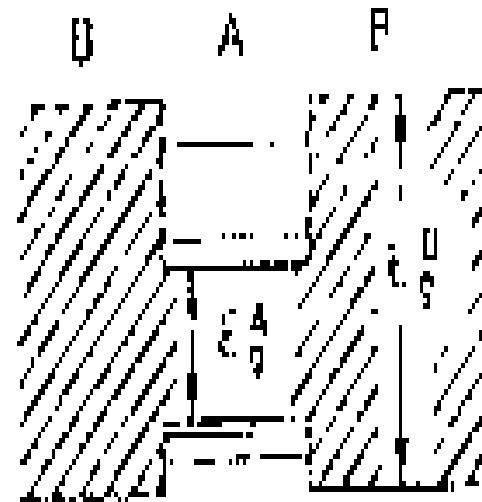
چاه های کوانتومی نوع اول و نوع دوم

اگر چاه ها در نوار رسانش و نوار ظرفیت در يك راستا قرار گیرند چاه کوانتومی نوع اول و اگر در يك راستا قرار نگیرند چاه کوانتومی نوع دوم خواهد بود .

$$E_c^A - E_c^B = \Delta E_c < 0$$

$$E_v^A - E_v^B = \Delta E_v > 0$$

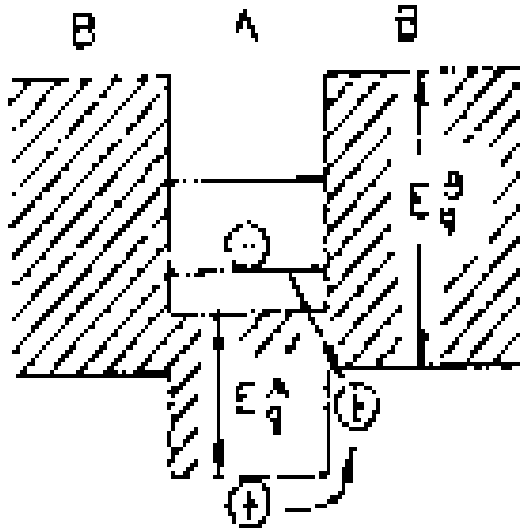
$$\Delta E_c, \Delta E_v < E_g^B - E_g^A$$



چاه کوانتومی نوع اول

Quantum

Well ها

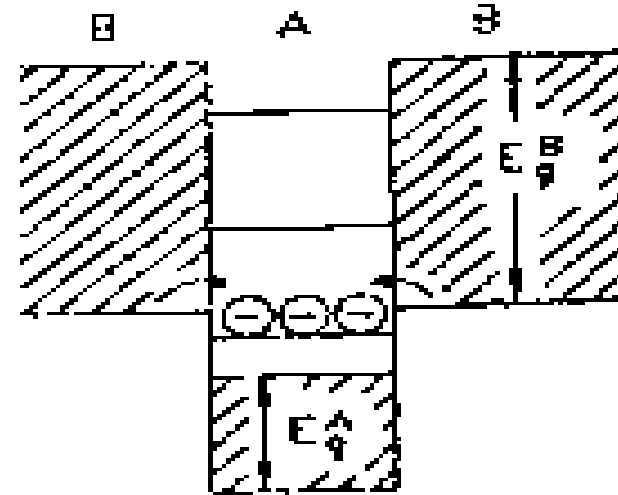


$$E_c^A - E_c^B = \Delta E_c < 0$$

$$E_v^A - E_v^B = \Delta E_v < 0$$

$$\Delta E_c, \Delta E_v < E_g^B - E_g^A$$

$$\Delta E_c, \Delta E_v < E_g^B$$



$$\Delta E_c < 0$$

$$\Delta E_v < 0$$

$$\Delta E_c > E_g^B$$

چاه های کوانتومی نوع دوم

در ساختار شکل سمت راست نوار رسانش ماده **A** به لحاظ انرژی پایینتر از نوار ظرفیت ماده **B** قرار دارد و این امر موجب تشکیل یک ساختار مرکب رسانا (شبه فلزی) می شود نمونه از چنین ساختاری **GaSb-InAs** که برای آشکارسازی نور مادون قرمز مناسب است به کار می رود.

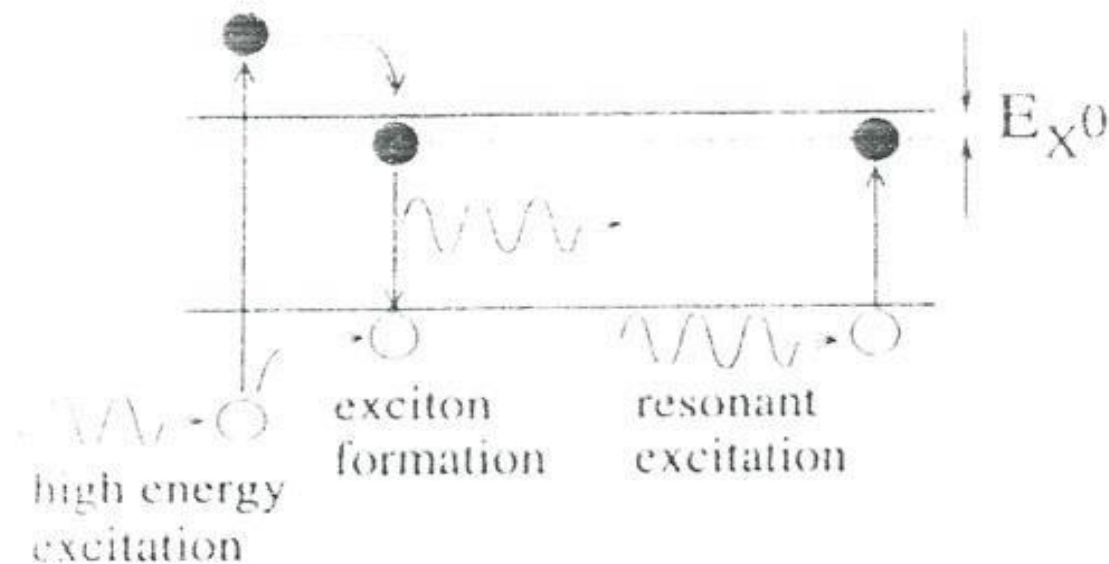
اکسیتون

اگر فوتونی با انرژی قابل قیاس با گاف انرژی بر یک نیمه رسانا فرود آید توسط الکترون های موجود در نیمه رسانا جذب می گردد این انرژی نوری جذب شده توسط الکترون ها سبب آزادی آن ها از قید اتم های همسایه شده و در نهایت الکترون ها آزادانه در بلور حرکت می کنند. این مسئله از دید تئوری نوارها در جامدات به منزله تحریک الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش می باشد.

اگر انرژی فوتون فرودی بیشتر از انرژی گاف نوار باشد این تحریک یک تحریک انرژی قوی به حساب می آید و درست مطابق شکل الکترون به نوار رسانش می رود و آزاد می گردد و جای خالی آن در نوار ظرفیت به عنوان حفره تعریف می گردد. حفره دارای بار مثبت می باشد از این رو با الکترون در نوار رسانش پیوند برقرار می کند که به آن جفت الکترون حفره تحت جاذبه پتانسیل کوئنی یا به اصطلاح اکسیتون گفته می شود و به مقدار انرژی کاهش یافته الکترون و حفره در اثر پتانسیل کوئنی انرژی بستگی گفته می شود که با E_B مشخص شده است.

فوتون هایی که انرژی مساوی با انرژی گاف نوار دارند نیز می توانند جذب گردند و منجر به تولید اکسیتون به طور مستقیم شوند به این شیوه تحریک، تحریک تشدید می گفته می شود که در شکل نمایش داده شده است . سیستم اکسیتونی یک ساختار نسبتاً پایدار است و در نوع خود طول عمر نسبتاً بالایی دارد که از درجه ۱۰۰ پیکو تا نانو ثانیه متغیر است.

Quantum Well ها



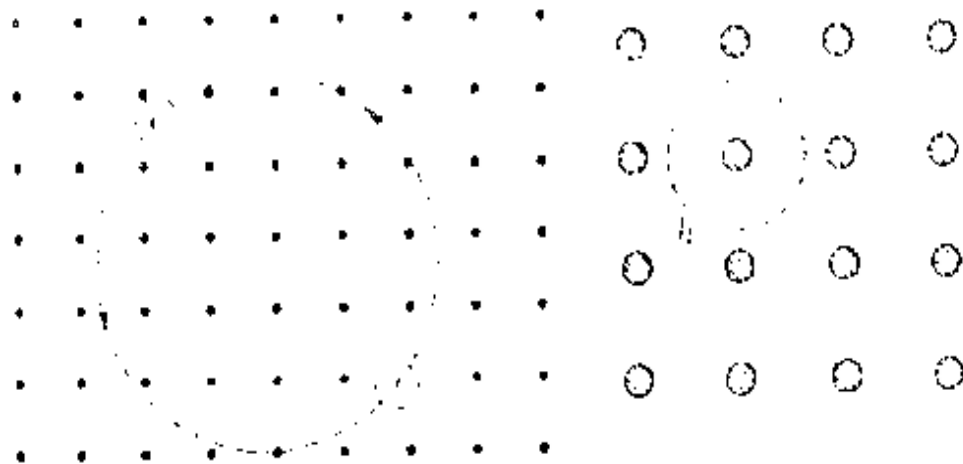
اکسیتون ها شباهت زیادی به اتم هیدروژن دارند که علت آن جرم بسیار بزرگ حفره نسبت به الکترون می باشد از این رومی توان نظریه بوهر را جهت بررسی خواص اکسیتون به کار برد. شعاع اکسیتونی و یا فاصله نسبی میان الکترون و حفره نیز به همین دلیل در اکثر مواقع شعاع بوهر اکسیتون نامیده می شود .

Quantum

Well ها

انواع اکسیتون

اکسیتون ها در بسیاری از مواد بلوری یافت می شوند اما به طور کلی دو نوع اصلی از ان ها وجود دارند: اکسیتون های وانیر-مات و یا اکسیتون های فرنکل که به اکسیتون های تنگ مقید هم مشهورند. اکسیتون های وانیر عموماً در نیمه رسانا ها دیده می شوند در حالی که اکسیتون های فرنکل در بلورهای عایق و بلورهای مولکولی دیده می شوند. این دو نوع اکسیتون در شکل زیر نمایش داده شده اند. شکل یک الکترون و حفره را نشان می دهد که به دور یکدیگر می چرخند.



Ga دارای ۳۱ الکترون است و دارای ۳ الکترون در لایه خارجی خود می باشد ولی آرسنیک ۳۳ دارای ۵ الکترون در لایه خارجی خود است با ترکیب این دو اتم و شکافتگی ترازها ، ترازهای پیوندی و پاد پیوندی تشکیل میشود که ترازهای پیوندی کاملاً پر و ترازهای پاد پیوندی کاملاً خالی است .

اگر این سلول واحدها را که ترکیبی مانند شکل زیر دارند در کنار یکدیگر به عنوان بلور گالیم آرسناید در نظر بگیریم در نتیجه ترازها به نوارها شکافته می شوند یعنی تراز پیوندی به نوار ظرفیت و تراز پاد پیوندی به نوار رسانش تبدیل میشود.

این قضیه به بررسی حالت های ساکن برای سیستم های تناوبی مانند کریستال ها در فیزیک حالت جامد می پردازد.
بردار انتقال برای یک کریستال به این صورت تعریف می شود:

$$R_n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$$

شبهه تحت این انتقال ثابت می ماند می خواهیم هامیلتونی نیز ناوردایی خود را حفظ کند برای این همخوانی عملگر یکانی را به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$U(R_n) H U^{-1}(R_n) = H$$

این عملگر های یکانی با یکدیگر و همچنین با H جابجا می شوند. پس داریم:

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

بلوخ اين قضيه مهم را اثبات كرد كه پاسخ هاي معادله شرودينگر براي يك پتانسيل دوره اي بايد به شكل خاصي باشد.

$$\Psi_k(r) = U_k(r)e^{ik \cdot r} = \text{موج تخت} \times \text{دوره شبکه بلور}$$

رفتار اکسیتون در حضور میدان مغناطیسی یکنواخت در حد دو و سه بعدی

با اعمال میدان خارجی بر روی ساختارهای کوانتومی از جمله چاههای کوانتومی می توان بدون نیاز به رشد لایه های متفاوت در ابعاد مختلف ، بسیاری از خواص اپتیکی و الکترونیکی ساختار را کنترل و به بهره بالا در ساخت قطعات دست یافت . از جمله کارهای صورت گرفته در این زمینه اعمال میدان مغناطیسی بر چاه کوانتومی $GaAs / GaAlAs$ و بررسی رفتار اکسیتون در این ساختار و محاسبه انرژی بستگی آن می باشد. از لحاظ تئوری معمولا از تقریب جرم موثر و روش وردشی به محاسبه انرژی بستگی می پردازند بطوریکه در مرجع با در نظر گرفتن تابع موج هیدروژن گونه $1S$ در حد دو بعدی مسئله بررسی شده است . با حضور میدان مغناطیسی، استفاده از توابع موج آزمایشی در حدهای سه بعدی و عمومی در این ساختارها بر اساس مرجع کمتر دیده شده است و لذا در این کار این مسئله بررسی و نتایج بدست آمده ارائه و بین حالتیهای متفاوت مقایسه می گردد.

- ❖ Excitonic Emission of AlGaAs/GaAs Quantum Well Heterostructures
- ❖ International Journal of Scientific & Engineering Research, Volume 6, Issue 9, September-2015
- ❖ M. Rashad
- ❖ **Abstract:** Excitonic Emission of $\text{Al}^x\text{Ga}^{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}^x\text{Ga}^{1-x}\text{As}$ Quantum Well with different contents of Al of (0.1 to 0.4) was studied theoretically. The investigation of excitonic emission of GaAs overgrown in AlGaAs matrix was calculated using the method of finite differences to find the one-dimensional band diagram of a semiconductor structure. Based on a solution of Schrödinger's equation, the program calculated the conduction and valence bands, and the hole and electron concentrations. The results of the calculations of the band gap of $\text{Al}^x\text{Ga}^{1-x}\text{As}$ layers with different Al contents shows that with increasing Al content, the band gap of $\text{Al}^x\text{Ga}^{1-x}\text{As}$ is increasing. The layers of $\text{Al}^x\text{Ga}^{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}^x\text{Ga}^{1-x}\text{As}$ quantum well were formed where AlGaAs acts as a barrier around GaAs which contribute to confinement of the carriers in GaAs layer. Our calculations observed that, this barrier height increasing with increasing of Al content from $x=0.1$ to 0.4.

1 INTRODUCTION

Quantum wells are one example of heterostructures structures made by joining different materials, usually in layers, and with the materials joined directly at the atomic level. When two semiconductors are joined, it is not clear in advance how the different bands in the two materials will line up in energy with one another, and there is no accurate predictive theory in practice. Quantum wells are one example of heterostructures made by different materials layers. Hence, an important experimental quantity is the "band offset ratio"; this is the ratio of the difference in conduction band energies to the difference in valence band energies. Typical examples include growing thick GaAs or Al-GaAs layers and a subsequent analysis of the intensity of their optical properties. For GaAs/AlGaAs heterostructures, for example, approximately 67% of the difference in the band gap energies is in the conduction band offset, and 33% is in the valence band offset, giving a ratio 67:33 . In this material system, both electrons and holes see higher energies in the AlGaAs than in the GaAs, giving a so-called "Type I" system. They can be used for advanced electronic devices (e.g., modulation-doped field-effect transistors, heterojunction bipolar transistors, resonant tunneling devices), and optoelectronic devices and structures (e.g., laser diodes, photodetectors, quantum well and superlattice optical and optoelectronic devices) . In the present article, we will introduce theoretical excitonic emission of Al-GaAs/GaAs/AlGaAs quantum well.

We will briefly allude to the different Al content of the outer layer and its effect on the band gap on the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, then the effect of these changes of the band gap on the excitonic emission of the inner layer in detail .

2 THEORETICAL CONSIDERATION AND CALCULATIONS

Quantum size effects arise when the size of a nanocrystal is comparable to the length parameters i.e., the de Broglie wave-length λ and exciton Bohr radius a_B of the quasi-particles (electrons, holes and excitons) .

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3m_{e(h)}^*kT}} \quad a_B = \frac{\hbar^2 \epsilon_\infty}{e^2}$$

Where $m_{e(h)}^*$ is the effective mass of electron (hole), T is the temperature and h, k are Planck and Boltzmann constants, respectively. ϵ_∞ is the dielectric constant. At room temperature, λ is around 10 nm. For most common semiconductors a_B is in the range of 1-10 nm which indicates that quantum size effects are pronounced even for a particle with dimension ten to hundred times larger than the lattice constant.

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2M}\right)\nabla^2\Psi(x) + W(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Where the first term represents the kinetic energy operator for the electron and $V(r)$ is the periodic potential energy seen by the electron. And $\Psi(x)$ is the wave-function.

In general, the potential $V(r)$ may include the ionic potential as well as any electron-electron interactions. Since the potential is periodic with respect to lattice translations then the $V(r)$ has the property:

$$V(r) = V(r + T)$$

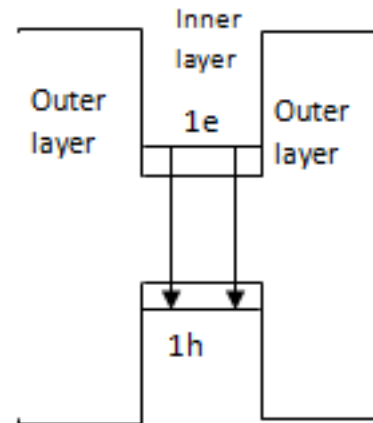
Where T represents a lattice vector. The Bloch theorem indicates that an eigen function of the Schrödinger equation for a periodic potential is the product of a plane wave e^{ikr} times a function $u_{v,k}(r)$ which has the same periodicity as the periodic potential. Thus, we get:

$$\Psi_{v,k}(r) = u_{v,k}(r)e^{ikr} \quad u_{v,k}(r) = u_{v,k}(r + T)$$

Assuming a parabolic band , the eigenvalues of last equation for the eigenfunctions are given by :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*}$$

With m^* being the effective mass of electron or hole.



Schematic diagram of optical transitions for type 1 quantum well.

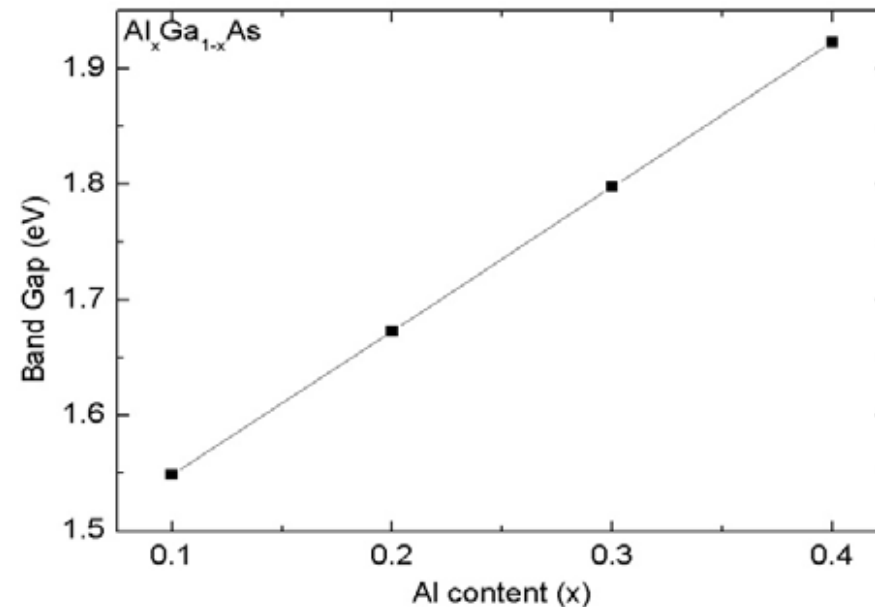
There are three cases of the band alignment can be distinguished, denominated type-I, reverse type-I, and type-II band alignment. In type-I, the shell is used to passivity the surface of the core with the goal to improve its optical properties. In reverse type-I systems, a material with narrower band-gap is overgrown onto the core with wider band gap. Charge carriers are at least partially delocalized in the shell and the emission wavelength can be tuned by the shell thickness. The most extensively analyzed systems of this type are CdS/HgS, CdS/CdSe and ZnSe/CdSe. In type-II systems, shell growth aims to a significant red-shift of the emission wave-length of the NCs. In the present work, type-I of the band-gap of the outer material is larger than that of the inner layer and both electrons and holes are confined in it as shown

3 SAMPLE CONFIGURATION

The sample consisted of AlGaAs/GaAs/AlGaAs quantum well. The width of the sample is 20 nm/10 nm/20 nm as shown below

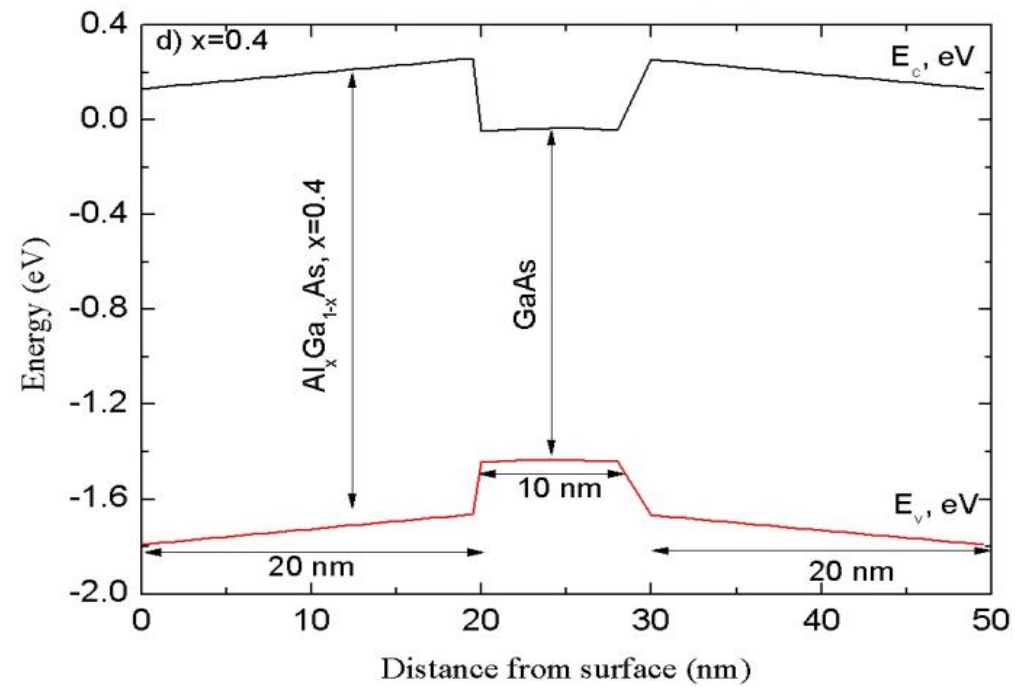
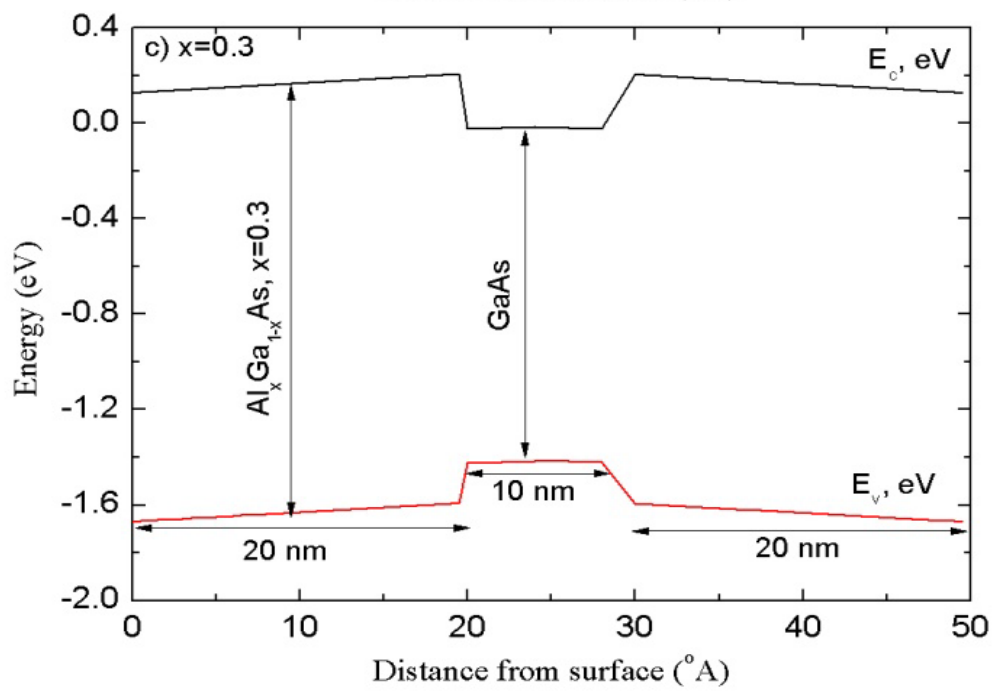
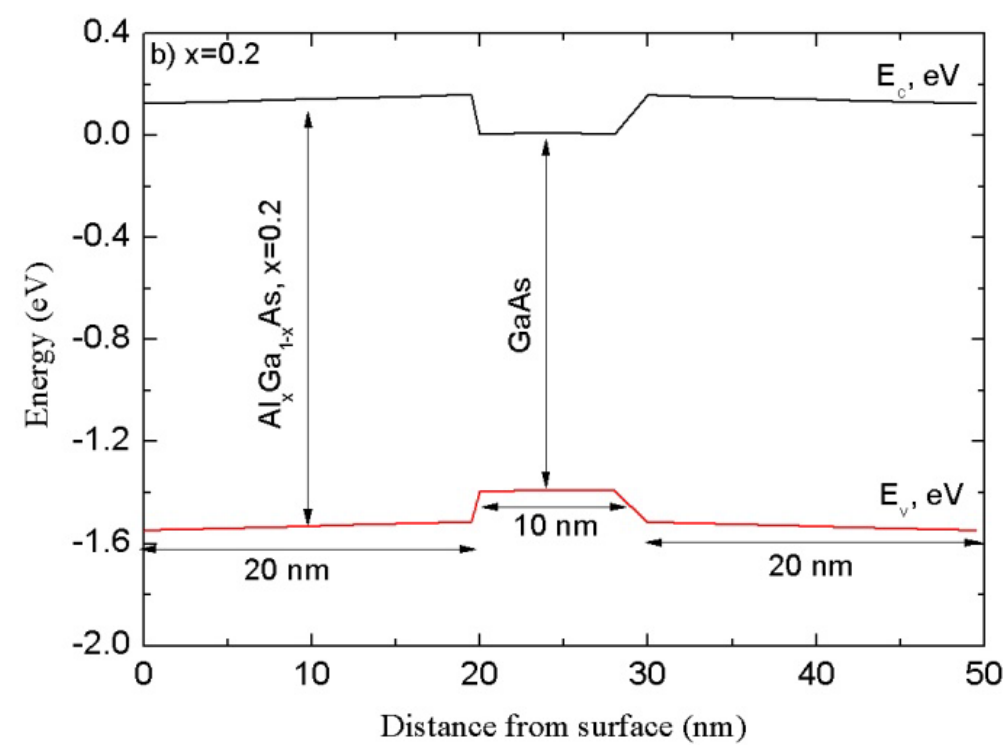
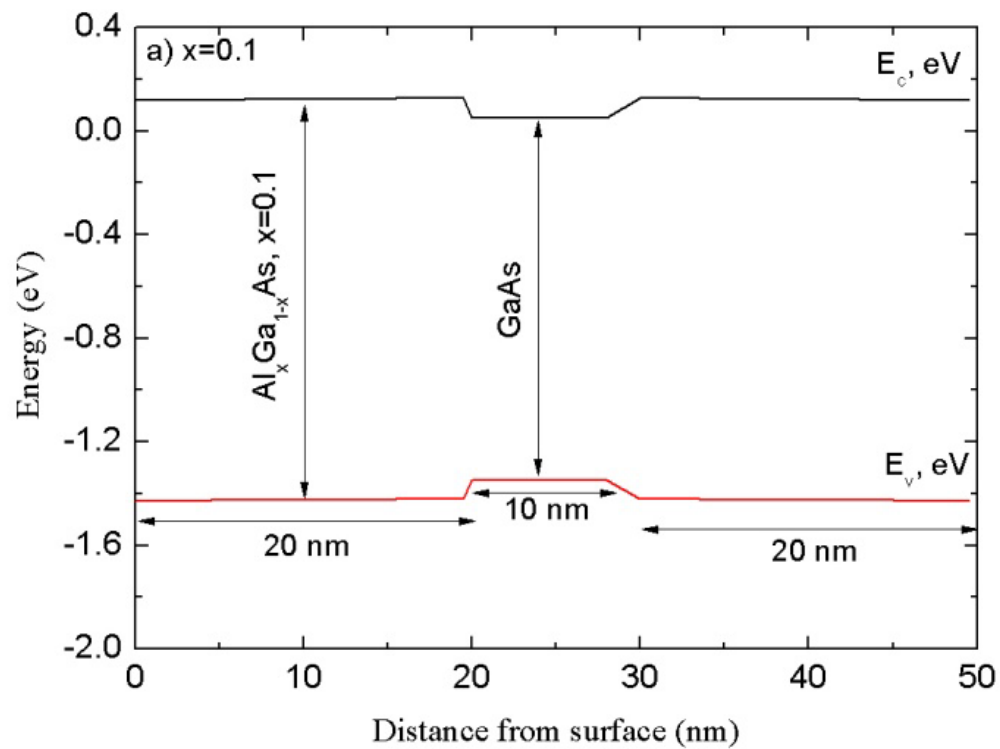


It is observed from this figure that with increasing Al content, the band gap of AlGaAs is increasing. Suggest that there are layers of AlGaAs/GaAs/AlGaAs quantum well were formed. The AlGaAs acts as a barrier around GaAs which contribute to confinement of the carriers in GaAs layer. 1D Poisson program was used for calculation the conduction and valence bands, and the hole and electron concentrations. The program presents all of the quantized hole and electron states, whether they are occupied or not.

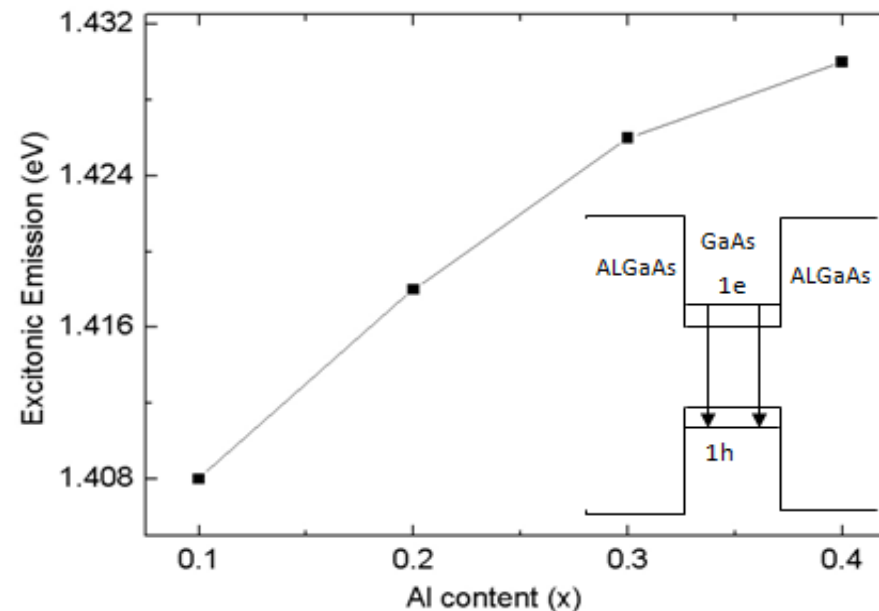


The calculated band gap of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ with different values of Al content (x)

The chart in next page gives these resulting band structures used in the model calculations by 1D Poisson program for AlGaAs/GaAs/AlGaAs with (a) $x=0.1$, (b) $x=0.2$, (c) $x=0.3$, and (d) $x=0.4$. Before presenting the results of the calculations, brief comments about the course of these calculations of the QW should be made. The starting GaAs thin layer has an average thin of 10 nm. As shown in next page, the 20 nm of Al-GaAs acts like an outer layer around the GaAs thin layer. For overgrown GaAs in AlGaAs matrix, shown in figure (a, b, c, and d), there is an increasing of Al content from $x=0.1$ to 0.4. This barrier height increasing with increasing of Al content from $x=0.2$ to 0.4. The shift between the energy levels of the GaAs in AlGaAs matrix as a function of Al content are calculated and plotted in two next page. The results in the two next page clearly revealed that for the particular band offset, the eigenvalue of the inner layer increase as the well height increase of the outer layer. The observation is due to the fact that as the conduction band or the potential barrier height for the electron increases. Thus it is observed that the confinement energies of the QW increase with the height of the potential barrier. The results of the calculated band structures are compared with experimental data of many workers. For all four types of $\text{Al}^x\text{Ga}^{1-x}\text{As}$ outer layer, we find a quantitative agreement between experimental and calculated data.



P. Acosta-Díaz et. al presented results of a photoluminescence spectroscopy (PL) study of AlGaAs/GaAs QWs, $x=0.3$ grown by MBE on GaAs buffer layers. Their QWs exhibit drastic changes in their PL spectra depending on the type of interruption process performed on the GaAs buffer layer surface. They obtained an energy of 1.505 eV which is very close to the position of the first peak at 1.507 eV, therefore they assign this peak to the emission from the 5000 Å-thick GaAs buffer layer. Their experimental results is compared with the predication results calculated by our model at $x=0.3$. The difference between thier energy value comes from the difference of GaAs thickness



Similar behavior is observed of type I Multiple Quantum Well (MQW) system of GaAs-AlGaAs grown by molecular beam epitaxy (MBE) by Ajayi Jonathan Olanipekun et. al. This work aims at investigating the comparison between experiment via optical absorption (OA) and photoluminescence (PL) and theory via envelope function approximation model vis-à-vis the band gaps and band offsets of type I multiple quantum well (MQW) of GaAs-AlGaAs system. The measurements of optical absorption (OA) and photoluminescence (PL) have been carried out on type I Multiple Quantum Well (MQW) system of GaAs-AlGaAs grown by molecular beam epitaxy (MBE). It is revealed from their investigations that the confinement energies of the particles increase with increase in the height of the potential barrier for electron. The increase is more pronounced in the case of the light hole. However, these findings revealed clearly that the confinement energies of the particles vary as the band offsets. We consider this as a strong support of the assumptions made above indicating that GaAs incorporated in a $Al_xGa_{1-x}As$ matrix maintain their optical properties.

5 CONCLUSION

A matrix of AlGaAs/GaAs/AlGaAs QW with (a) $x=0.1$, (b) $x=0.2$, (c) $x=0.3$, and (d) $x=0.4$ is suggested. The conduction and valence bands, then the hole and electron concentrations are calculated. It is observed with increasing Al content, the band gap of AlGaAs is increasing. The AlGaAs barrier around GaAs contributes to confinement of the carriers in GaAs layer. The results of the calculated band structures are compared with experimental data of many workers. For all four types of AlGaAs QW with (a) $x=0.1$, (b) $x=0.2$, (c) $x=0.3$, and (d) $x=0.4$ outer layer, we find a quantitative agreement between experimental and calculated data .

جمع بندی

✓ آشنایی با چاه کوانتومی و انواع آن

✓ اکسیتون و انواع آن

✓ ساختار نواری **GaAs**

✓ تعریف قضیه بلوخ

✓ بررسی مقاله