

(دریافت مقاله: ۱۳۸۷/۱۱/۱؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۸۸/۱۱/۲۱)

( S ) -

(FWHM) ( S )

پارامترهای تحرک پذیری، مقاومت، ثابت شبکه و گاف نواری آلیاژ مذکور را گزارش نموده‌اند [۴].

به‌دلیل گستردگی گاف نواری از ناحیه مادون قرمز تا ماورای بنسن ( $2eV/6-7\text{ eV}$ ) در نیمرساناهای نیتروژن‌دار و اهمیت آنها در کاربردهای صنعتی به‌ویژه در صنایع اپتوالکترونیک از جمله به‌کارگیری آن در ساخت دیودهای نورگسیل [۵-۸] که پایه تولید منابع نوری جدید می‌باشند و به‌کارگیری آنها در ساخت قطعات توان<sup>۱</sup> و نیز قطعات فرکанс بالا [۹ و ۱۰]، مطالعه این مواد و نانوساختارهای آنها هم از جنبه نظری و هم از جنبه عملی حائز اهمیت بوده و در بسیاری از مراکز پژوهشی مورد توجه می‌باشد.

یکی از اهداف مهم در پژوهه‌های تحقیقاتی مربوط به دیودهای نورگسیل به‌ویژه LED سفید [۱۱]، رسیدن به بازده

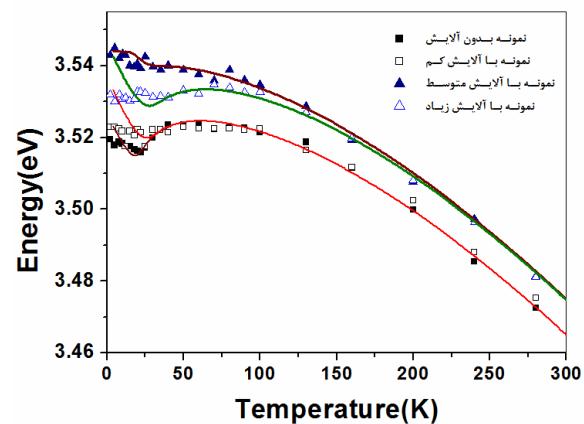
نیمرسانای نیتروژن‌دار، ترکیبی از عناصر گروه سوم جدول تناوبی با عنصر نیتروژن می‌باشد که دارای ساختارهای بلوری ورتسایتس (Wz) و زینک بلند (ZB) بوده که ساختار ورتسایتس از نظر ترمودینامیکی پایدارتر است در حالی که ساختار مکعبی آن در فشار بالا قابل دستیابی می‌باشد [۱ و ۲]. آلیاژهای سه‌تایی و چهارتایی این نیمرساناهای که از ترکیب دوتایی آنها تهیه می‌شوند دارای ویژگی‌های منحصر بفردی‌اند که کاربردهای گستردگی در قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی دارند. برای مثال از ترکیب نیمرسانای  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  و  $\text{AlN}$  آلیاژ  $\text{Al}$  به وجود می‌آید که  $x$  کسر مولی  $\text{Al}$  در این آلیاژ می‌باشد. ویژگی‌های این آلیاژ از دهه ۷۰ میلادی به بعد مورد بررسی قرار گرفت [۳] و این تحقیقات هم اکنون نیز ادامه دارد. یوشیدا و همکارانش تحقیقات گستردگی را در این زمینه انجام داده و

۱. Power devices

و آالایش دار را مورد مطالعه قرار دهیم. در این مقاله ابتدا نمونه‌های مورد مطالعه معرفی و به دنبال آن تغییرات دمایی طیف گسیلی نمونه‌ها بررسی می‌شود و سپس ضمن ارائه مدل LSE به تحلیل و تفسیر کمی نمونه‌ها می‌پردازیم و در انتها جمع‌بندی نتایج حاصل از این مطالعه ارائه می‌گردد.

نمونه‌های مورد مطالعه مشکل از نانوساختار چاه‌های کوانتموی چند گانه GaN/AlGaN می‌باشند که در روی زیر لایه اکسید الومینیوم با جهت ترجیحی (۰۰۰۱) رشد یافته‌اند. جزئیات مربوط به ساختار نمونه‌ها و روش سنجش اپتیکی آنها در مقالات قبلی مولفین گزارش شده است [۱۳، ۱۴]. این نمونه‌ها چاه‌های کوانتموی چند گانه بدون آالایش (Undoped) و آالایش یافته (Doped) با مقادیر مختلف سیلیکون شامل نمونه‌های آالایش کم ( $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ )، آالایش متوسط ( $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ) و آالایش زیاد ( $9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ) می‌باشند.

نقاط هندسی در شکل ۱ تغییرات دمایی قله طیف فتلومینسانس (PL) نمونه‌های چاه کوانتموی  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$  آالایش دار و بدون آالایش را نشان می‌دهد که به طور تجربی مورد سنجش قرار گرفته‌اند [۱۴] و خطوط توپر بر اساس مدل توری حالات جایگزیده ترسیم شده است که در ادامه مورد بحث قرار می‌گیرد. همان‌طوری که در شکل ۱ دیده می‌شود، در تمام دامها با افزایش مقدار آالایش، ابتدا قله طیف PL چاه کوانتموی به سمت انرژی بالاتر (جابه‌جایی آبی) انتقال می‌یابد که ناشی از استارت میدان‌های پیروالکتریک داخلی به علت افزایش الکترون‌ها در چاه کوانتموی می‌باشد [۱۵] و با ادامه افزایش میزان آالایش، قله طیف PL به سمت انرژی پایین (جابه‌جایی قرمز) متغیر می‌گردد که این روند به اثر بازبهنجارش گاف نواری نسبت داده می‌شود [۱۶]. انرژی قله طیف PL نمونه بدون آالایش دارای جابه‌جایی قرمز-آبی-قرمز متوالی (رفتار S گونه) بوده که این رفتار به



شکل ۱. تغییرات دمایی قله طیف فتلومینسانس نمونه‌های آالایش دار و بدون آالایش (نقاط هندسی معرف داده‌های تجربی بوده و خطوط توپر براساس مدل تئوری LSE ترسیم شده است).

نوری بالا به منظور جایگزینی لامپ‌های روشنایی فعلی با نسل جدید منابع نوری بربایه LED می‌باشد. وجود چگالی بالای نقایص ناشی از عدم انطباق ثابت شبکه لایه با زیر لایه در آلیاژ نیمرسانی نیتروژن‌دار به‌ویژه چاه کوانتموی  $\text{GaN}/\text{AlGaN}$ ، بازده نوری را کاهش می‌دهد که غالباً ناشی از به وجود آمدن مراکز بازترکیب غیر نوری در نانوساختارهای مربوطه می‌باشد. از طرفی جایگزیدگی اکسیتون‌ها در افت و خیزهای پتانسیل، حساسیت بازده نوری به چگالی نقایص را کاهش می‌دهد. به عبارت دیگر افت و خیزهای پتانسیل باعث به تله افتادن اکسیتون‌ها در حالات جایگزیده گردیده و از رسیدن آنها به مراکز غیر نوری جلوگیری می‌کند و در نتیجه افزایش بازده نوری را به همراه دارد [۱۲]. به همین جهت بررسی مسئله جایگزیدگی اکسیتون‌ها از جنبه تجربی با کمک طیف نمایی فتلومینسانس وابسته به دما دارای اهمیت زیادی است. به منظور بررسی جایگزیدگی اکسیتون‌ها مدل‌های نظری مختلفی از جمله مدل حالات جایگزیده<sup>۱</sup> مطرح می‌باشد که در این مقاله سعی داریم با کمک مدل مذکور داده‌های تجربی مربوط به وابستگی دمایی طیف فتلومینسانس چاه‌های کوانتموی  $\text{GaN}/\text{AlGaN}$  بدون آالایش

۱. Localized States Ensembles (LSE)

بیرون آمدن از پتانسیل های عمیق و گذار به پتانسیل های بالاتر را به دست می آورند [۱۷]. بنابراین باز توزیع حرارتی اکسیتون ها در افت و خیزهای پتانسیل در نمونه بی آلایش منجر به رفتار S گونه می گردد. با افزایش میزان آلایش در نمونه، افت و خیزهای پتانسیل استقرار شده و ارتفاع سد پتانسیل کاهش می یابند (خطوط توپر در شکل ۲) و این موجب کاهش رفتار S گونه می شود به طوری که در نمونه با آلایش متوسط بیشینه استقرار رخ می دهد و رفتار S گونه تقریبا ناپدید می گردد (شکل ۱- مثبت ترتیب نماینده اکسیتون های غیر جایگزیده و جایگزیده هستند. فلش ها فرآیند ریلکس شدن اکسیتون ها به داخل کمینه های انرژی موضعی و مطلق را نشان می دهند. نقاط خط چین میان طرحواره نمونه با افت و خیز پتانسیل بزرگ تر است. ۱۷ و ۱۸ به ترتیب ارتفاع سد پتانسیل برای چاههایی با پتانسیل موضعی و مطلق می باشند [۱۷].)

در دماهای بالا رفتار دمایی قله طیف PL تمام نمونه ها شبیه نیمرسانی ایده آل بوده و از رابطه تجربی ورشنی پیروی می کند [۱۸]

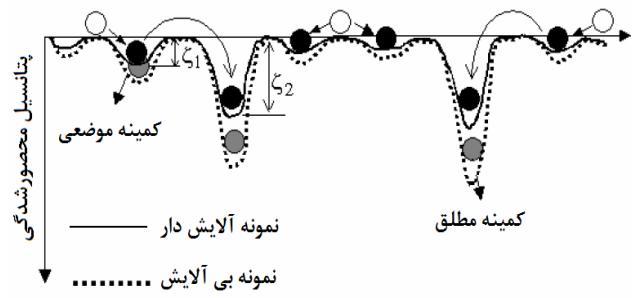
$$E_g(T) = E_{\infty} - \alpha T^{\beta} / (\Theta + T), \quad (1)$$

در این رابطه  $\alpha$  و  $\beta$  به ترتیب پارامتر ورشنی و دمای دبای می باشند که از انتباط رابطه (۱) با داده های تجربی در شکل ۱ در دماهای بالا، پارامترهای مذکور برای تمام نمونه ها به ترتیب مقادیر گزارش شده با گروه های تحقیقاتی دیگر از جمله لروکس و همکارانش دارد [۱۹].

انرژی جایگزیدگی اکسیتون ها در دمای پایین از اختلاف بین انرژی قله طیف PL و انرژی به دست آمده از رابطه ورشنی ( $E_g(T)$ ) محاسبه می شود که برای نمونه های بسیار کم، متوسط و زیاد آلایش یافته به ترتیب  $14 \text{ meV}$ ،  $12 \text{ meV}$ ،  $10 \text{ meV}$  و  $6 \text{ meV}$  به دست می آید. این روند کاهشی افزایشی انرژی جایگزیدگی اکسیتون ها به کاهش و افزایش افت و خیزهای پتانسیل نسبت داده می شود. در ادامه ضمن معرفی مدل نظری حالات جایگزیده (LSE) به بررسی کمی تغییرات دمایی طیف گسیلی می پردازیم.

(LSE)

مدل نظری حالات جایگزیده (LSE) که براساس باز توزیع



شکل ۲. طرحواره پتانسیل محصور شدگی برای دو نمونه با میزان افت و خیز پتانسیل متفاوت (افت و خیز پتانسیل در نمونه بدون آلایش بیشتر از نمونه آلایش یافته می باشد). دواire توخالی و توپر به ترتیب نماینده اکسیتون های غیر جایگزیده و جایگزیده هستند. فلش ها فرآیند ریلکس شدن اکسیتون ها به داخل کمینه های انرژی موضعی و مطلق را نشان می دهند. نقاط خط چین میان طرحواره نمونه با افت و خیز پتانسیل بزرگ تر است. ۱۷ و ۱۸ به ترتیب ارتفاع سد پتانسیل برای چاههایی با پتانسیل موضعی و مطلق می باشند [۱۷].

جایگزیدگی اکسیتون ها در افت و خیزهای پتانسیل در چاه کوانتومی و یا فصل مشترک چاه و سد نسبت داده می شود. با افزایش مقدار آلایش در سد، رفتار S گونه کاهش یافته که به علت پرشدن حالت جایگزیده ناشی از افزایش الکترون ها در چاه بر اثر یونیزه شدن اتم های سیلیکون در ناحیه سد می باشد و این روند تا جایی ادامه می یابد که رفتار S گونه تقریبا ناپدید می گردد. با ادامه افزایش مقدار آلایش سیلیکونی رفتار S گونه دوباره نمایان می شود که این امر ناشی از نقاچیس ایجاد شده در ناحیه سد به علت چگالی خیلی بالای آلایش سیلیکونی در سد بوده و منجر به ایجاد حالات جایگزیده در نوار ظرفیت گردیده و به دنبال آن باعث جایگزیدگی حفره ها و در نتیجه اکسیتون ها می گردد. این نتیجه از روی طیف نمایی فتلولمینسانس وابسته به زمان قابل توضیح است [۱۴].

برای بررسی رفتار S گونه نمونه ها در دمای پایین از طرحواره باز توزیع حرارتی اکسیتون ها در افت و خیزهای پتانسیل نوار رسانش استفاده می کنیم (شکل ۲). موقعی که دمای نمونه افزایش می یابد ابتدا حامل های جایگزیده انرژی لازم برای انتقال به پتانسیل عمیق (به بزرگی ۱۷) و عمیق تر (به بزرگی ۱۸) را کسب می کنند و سپس با ادامه افزایش دما انرژی لازم برای

$$\frac{dN(E,T)}{dt} = G(E) + \gamma_c \int \frac{N(E',T)}{\tau_{tr}} e^{(E'-E_a)/k_B T} dE' \\ \times \frac{\rho(E)}{\int_E \rho(E) dE} - \frac{N(E,T)}{\tau_{tr}} e^{(E-E_a)/k_B T} - \frac{N(E,T)}{\tau_r}. \quad (3)$$

در رابطه بالا از سمت راست جمله اول ( $G(E)$ ) آهنگ تولید اکسیتونها ناشی از تحریک الکتریکی یا اپتیکی می باشد که متناسب باتابع توزیع چگالی حالات جایگزینده است ( $G(E) = k\rho(E)$  که  $k$  ثابت تناسب می باشد). جمله دوم آهنگ افزایش چگالی اکسیتونها جایگزینده به علت باز به تله افتادن اکسیتونها در حالات جایگزینده را نشان می دهد. جمله سوم و چهارم میین کاهش جمعیت اکسیتونها جایگزینده به ترتیب ناشی از برانگیخته شدن آنها با کسب انرژی دمایی (فرار از حالات جایگزینده) و بازترکیب تابشی اکسیتونها جایگزینده می باشد. در رابطه (۲)،  $E_a$  سد پتانسیلی است که اکسیتونها باید بر آن غلبه نموده تا به حالات دیگر انتقال یابند،  $\tau_{tr}$  و  $\tau_r$  به ترتیب زمان انتقال و زمان بازترکیب تابشی اکسیتونها هستند و  $\gamma_c$  ضریب (بدون بعد) باز به تله افتادن اکسیتونها می باشد.

با اعمال شرط حالت پایا (ثابت بودن چگالی جمعیت اکسیتونها جایگزینده) طرف چپ معادله (۳) صفر می گردد و در نتیجه جواب معادله مذکور به صورت زیر نوشته می شود:

$$N(E,T) = g(T)n(E,T). \quad (4)$$

به طوری که  $g(T)$  صرفاً تابع دما و  $n(E,T)$  تابع دما و انرژی بوده و از روابط زیر پیروی می کند:

$$g(T) = \frac{k\tau_{tr}}{(1-\gamma_c) + (\tau_{tr}/\tau_r)\gamma_c\zeta_c(T)/\Lambda}, \quad (5\text{-الف})$$

$$n(E,T) = \rho(E)f(E,T), \quad (5\text{-ب})$$

که در رابطه (۵-الف) و

$f(E,T) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(E')dE' = \Lambda$  می باشند و در رابطه (۵-ب) عبارت است از:

$$f(E,T) = \frac{1}{e^{(E-E_a)/k_B T} + \tau_{tr}/\tau_r} \quad (6)$$

$f(E,T)$  در رابطه بالا به عنوان تابع توزیع حالات جایگزینده می باشد. با توجه به شباهت بین تابع توزیع حالات جایگزینده

حرارتی حاملها (مطابق شکل ۲) بنا نهاده شده، برای توصیف و تفسیر کمی رفتار دمایی قله و پهنا و سطح زیر منحنی طیف گسیل اپتیکی نیمرساناهای دارای حالات جایگزینده به ویژه نیمرساناهای نیتروژندار در محدوده دمای پایین به کار می رود. این مدل اولین بار توسط لی و همکارانش در سال ۲۰۰۵ ارائه گردید [۲۰] و آنرا برای توصیف کمی تغییرات دمایی طیف گسیلی نقاط کوانتومی InGaN/GaN و InGaAs/GaAs و GaInAsN/GaAs [۲۱-۲۳] استفاده نمود. لورنکو و همکارانش در سال ۲۰۰۷ با کمک این مدل تغییرات دمایی طیف گسیلی چاههای کوانتومی GaAsSb/AlGaAs را مورد بررسی قرار دادند [۱۷]. در این LSE بخش قصد داریم ابتدا به طور مختصر به توصیف مدل پرداخته و سپس با پارامترهای مهم این مدل تغییرات دمایی طیف گسیلی چاههای کوانتومی GaN/AlGaN با آلایش های مختلف را بررسی نماییم.

همان طوری که در بخش قبل اشاره شد موقعی که دمای نمونه افزایش می باید حاملها برانگیخته شده و به حالات جایگزینده منتقل می گرددند (شکل ۲). این امر موجب باز توزیع حرارتی حاملها جایگزینده شده به طوری که این فرآیند روی تغییرات دمایی طیف گسیلی نمونه تأثیر می گذارد و در محدوده دمای پایین رفتار غیرعادی در قله و پهنهای طیف PL مشاهده می شود.

در آلیاژهای نیمرساناهای نیتروژندار، بازترکیب تابشی غالب از نوع اکسیتونها جایگزینده بوده [۱۳-۱۶] و تابع توزیع چگالی حالات اکسیتونها جایگزینده به صورت زیر در نظر گرفته می شود [۲۰]:

$$\rho(E) \propto \exp[-(E - E_0)^2 / 2\sigma^2], \quad (2)$$

که  $E_0$  و  $\sigma$  به ترتیب مرکز و پهنهای تابع توزیع گاوی فوک را نشان می دهد. بنابراین در یک سیستم با مجموعه ای از حالات جایگزینده به چگالی حالات  $\rho(E)$ ، آهنگ تغییر چگالی جمعیت اکسیتونها جایگزینده در انرژی  $E$  و دمای  $T$  ( $N(E,T)$ ) با توجه به باز توزیع حرارتی اکسیتونها از رابطه زیر پیروی می کند [۲۰]:

دوم و سوم به ترتیب پهن شدگی ناشی از پراکندگی حامل‌ها به‌واسطه فونون‌های آکوستیکی و اپتیکی طولی می‌باشند. پارامترهای  $\sigma_A$  و  $\gamma_{LO}$  به ترتیب شدت جفت شدگی اکسیتون‌ها با فونون‌های آکوستیکی و اپتیکی بوده و  $\hbar\omega_{LO}$  به انرژی فونون اپتیکی معروف می‌باشد.

سطح زیر منحنی طیف لومینسانس نیز با تعداد کل حامل‌های جایگزینده متناسب بوده و از رابطه زیر بدست می‌آید [۲۰]:

$$I(T) \propto \left\{ 1 + (1 - \gamma_c) \cdot \exp \left[ \frac{(E_0 - E_a) + k_B T \ln(\tau_r / \tau_{tr})}{\sqrt{(k_B T)^2 + 2(\sigma / 2.41)^2}} \right] \right\}^{-1} \quad (11)$$

خاموشی حرارتی لومینسانس<sup>۱</sup> از روی ضریب باز به تله افتادن ( $\gamma_c$ ) و آهنگ فرار حرارتی اکسیتون‌های جایگزینده ( $1/\tau_{tr}$ ) قابل پیش‌بینی می‌باشد به‌طوری‌که نمونه‌های با ضریب  $\gamma_c$  کوچک‌تر و پارامتر  $(1/\tau_{tr})e^{(E-E_a)/k_B T}$  بزرگ‌تر دارای خاموشی حرارتی لومینسانس سریع‌تر می‌باشند [۲۲ و ۲۳]. آهنگ فرار حرارتی حامل‌ها را می‌توان برای ارتباط آن با  $E_0 - E_a$  به صورت زیر باز نویسی کرد:

$$(1/\tau_{tr})e^{(E-E_a)/k_B T} = (1/\tau_{tr})e^{(E_0-E_a)/k_B T} e^{(E-E_0)/k_B T}. \quad (12)$$

در رابطه بالا  $(1/\tau_{tr})e^{(E-E_a)/k_B T}$  را با پارامتر C نشان داده و آن را پارامتر خاموشی نمونه می‌نامیم به‌طوری‌که نمونه با پارامتر C بزرگ‌تر دارای خاموشی حرارتی لومینسانس سریع‌تر می‌باشد. با یکسان فرض نمودن  $\tau_r$  برای نمونه‌ها، و با توجه به اینکه مقدار پارامتر  $\tau_r / \tau_{tr}$  در محاسبات مشخص می‌باشد، با بازنویسی پارامتر C به صورت  $(1/\tau_r) \times [\tau_r / \tau_{tr}] e^{(E_0-E_a)/k_B T}$ ، خاموشی حرارتی لومینسانس نمونه‌ها بر حسب  $\tau_r / \tau_{tr}$  قابل مقایسه می‌باشد.

حال مدل LSE را برای دو حالت خاص مورد بررسی قرار می‌دهیم:

الف) برای حالت  $\sigma = 0$  (چگالی حالت با تابع دلتای دیراک)،

تابع توزیع فرمی - دیراک می‌توان نتیجه گرفت که مفهوم نزدیکی بین  $E_a$  و تراز فرمی وجود دارد به طوری‌که تمام حالات جایگزینده با انرژی کمتر از  $E_a$  در دمای صفر کلوین اشغال شده‌اند. موقعیت  $E_a$  نسبت به  $E_0$  روی رفتار دمایی طیف گسیلی سیستم‌های فیزیکی تأثیر می‌گذارد [۲۳]. در محاسبات بالا مقادیر  $\tau_r$  و  $\tau_{tr}$  صرفاً به نمونه مورد مطالعه بستگی داشته و از وابستگی دمایی آنها چشم پوشی شده است.

از روی رفتار دمایی  $\tau_r / \tau_{tr}$  یا معادل آن  $n(E, T)$  یا  $N(E, T)$  تغییرات دمایی شکل طیف لومینسانس حالات جایگزینده و در نتیجه تغییرات دمایی قله، پهنا و سطح زیر منحنی طیف گسیلی ناشی از حالات جایگزینده شبیه سازی می‌شوند. با کمک  $\partial n(E, T) / \partial t = 0$ ، موقعیت قله تابع  $n(E, T)$  در دماهای مختلف از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$E = E_0 - x(T)k_B T \quad (7)$$

در رابطه بالا  $x(T)$  ضریب بدون بعد وابسته به دما بوده که مقدار آن از حل عددی معادله زیر به دست می‌آید:

$$x e^x = \left( \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \right) \left[ \left( \frac{\sigma}{k_B T} \right)^2 - x \right] e^{(E_0 - E_a)/k_B T}. \quad (8)$$

معادله قبل صرفاً یک جواب در محدوده  $(\sigma / k_B T)^2 < x < \infty$  دارد. بستگی دمایی در رابطه (7) صرفاً ناشی از توزیع حرارتی اکسیتون‌ها به حالات جایگزینده در دمای پایین بوده که از ترکیب آن با رابطه ورشنی می‌توان تغییرات دمایی قله طیف گسیلی را مطابق رابطه زیر در دماهای مختلف به دست آورد:

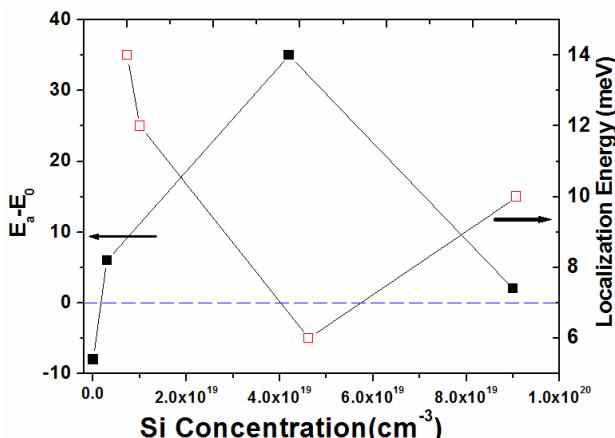
$$E = E_0 - \alpha T^2 / (\Theta + T) - x(T)k_B T. \quad (9)$$

تغییرات دمایی پهناور طیف (FWHM) شامل دو بخش می‌باشد: بخش اول ناشی از حالات جایگزینده در دماهای پایین بوده که  $E_p$  از حل عددی معادله  $n(E, T) = n(E_p, T) / 2$  به دست می‌آید (انرژی قله تابع  $n(E, T)$  می‌باشد) و بخش دوم ناشی از پراکندگی فونون‌ها و همچنین نقایص شبکه و ناخالصی‌ها بوده که از رابطه زیر پیروی می‌کند [۲۴]:

$$\Gamma(T) = \Gamma_0 + \sigma_A T + \frac{\gamma_{LO}}{e^{\hbar\omega_{LO}/k_B T} - 1} \quad (10)$$

در رابطه بالا، جمله اول پهن شدگی طیف گسیلی ناشی از پراکندگی حامل‌ها از نقایص شبکه و ناخالصی‌ها بوده و جمله

<sup>۱</sup>. Thermal quenching of luminescence



شکل ۳. تغییرات  $E_a$  (طرف چپ) و انرژی جایگزینی (طرف راست) نسبت به مقدار آالایش سیلیکون در سد.

رفتار S گونه می‌باشد (شکل ۱)، بهطوری که نمونه بی آالایش با داشتن کمترین مقدار  $E_a - E_\infty$ ، بیشترین رفتار S شکل را دارد و در نمونه آالایش متوسط با داشتن بیشترین مقدار  $E_a - E_\infty$ ، رفتار S گونه تقریباً ناپدید می‌گردد. از طرفی با افزایش مقدار آالایش، انرژی جایگزینی رفتار کاهشی-افزایشی داشته که دارای روندی مشابه مقدار  $E_a - E_\infty$  و رفتار S شکل می‌باشد (شکل ۳).

پارامتر دیگری که متأثر از مقدار آالایش می‌باشد، پارامتر  $\sigma$  است. با افزایش مقدار آالایش (تا آالایش متوسط) این پارامتر کاهش یافته و رفتار دمایی نمونه به سمت رفتار دمایی گاف نواری نزدیک می‌شود که این امر موید استثمار افت و خیزهای پتانسیل بهدلیل افزایش حامل‌ها می‌باشد ولی با ادامه افزایش مقدار آالایش، پارامتر  $\sigma$  افزایش یافته (جدول ۱) که این نشانه غالب شدن مجدد فرآیند باز توزیع حرارتی حامل‌ها بوده که به دلیل ظهور مجدد افت و خیزهای پتانسیل ناشی از نقايسص ساختاری می‌باشد.

شکل ۴ تغییرات دمایی پهنه‌ای طیف گسیلی نمونه‌ها را نشان می‌دهد که در دمای بالا رفتاری مشابه نیمرساناهای گروه III-V از خود نشان می‌دهد بهطوری که با افزایش دما، پهنه‌ای طیف گسیلی افزایش می‌یابد ولی در دمای پایین چنین رفتاری مشاهده نمی‌شود. تغییرات دمایی پهنه‌ای طیف نمونه‌ها در دمای بالا انطباق خوبی با رابطه<sup>۱۰</sup> (۱۰) داشته و مقادیر پارامترهای انطباقی  $\Gamma$  و  $\gamma_{LO}$  در جدول ۲ آمده است.  $\sigma_A$  و

جدول ۱. پارامترهای انتخابی برای مدل LSE برای نمونه‌های مورد مطالعه.

$\tau_r/\tau_{tr}$	$\sigma$ (meV)	$E_a - E_\infty$ (meV)	$E_\infty$ (eV)	نمونه
۱۰۰۰۰	۶	-۸	۳/۵۳۵	بی آالایش
۲۰۰۰۰	۳	۶	۳/۵۳۵	آالایش کم
۵۰۰۰۰	۳	۲۰	۳/۵۴۴	آالایش متوسط
۹۵۰۰	۶/۵	۲	۳/۵۴۵	آالایش زیاد

تابع فوق مدل معروف خاموشی حرارتی<sup>۱</sup> لومینسانس برای سیستم دو ترازی را توصیف می‌کند [۲۵]. در حالت  $\sigma = 0$  توزیع حرارتی اتفاق نمی‌افتد و سیستم عملاً توسط یک سیستم دو ترازی هم ظرفیت توصیف می‌شود. در سیستم دو ترازی، مقدار  $E_a - E_\infty$  به عنوان انرژی فعالسازی حرارتی حامل‌ها می‌باشد.

ب) در دمای بالا با اعمال شرط ۱  $(\frac{\tau_r}{\tau_{tr}}) e^{(E_\infty - E_a)/k_B T} \gg 1$  در مدل LSE به مدل دنباله نواری<sup>۲</sup> تبدیل می‌گردد [۲۶].

## LSE

موقعیت قله طیف گسیلی در دمای‌های مختلف را می‌توان با کمک رابطه (۹) و انتخاب مناسب پارامترهای  $\tau_r/\tau_{tr}$ ,  $\sigma$  و  $E_a - E_\infty$  با کمک مدل LSE شبیه سازی نمود. بهترین انتخاب برای پارامترهای بالا در جدول ۱ آمده است. خطوط توپر در شکل ۱ نتایج مربوط به محاسبات مدل LSE را نشان می‌دهد و انطباق نسبتاً خوبی با داده‌های تجربی دارد. در این محاسبات پارامتر ورشنی و دمای دبای ماده برای تمام نمونه‌ها به ترتیب مقادیر  $۰/۹$  meV/K و  $۸۸$  K در نظر گرفته شده است.

همان‌طوری که قبل اشاره شد پارامتر  $E_a$  دارای اهمیت ویژه‌ای می‌باشد به طوری که موقعیت آن نسبت به  $E_\infty$  روی رفتار دمایی طیف گسیلی نمونه تأثیر می‌گذارد. با افزایش مقدار آالایش، مقدار  $E_a - E_\infty$  افزایش و سپس کاهش می‌یابد (جدول ۱) که این امر به ترتیب متناظر با تضعیف و تقویت

۱. Thermal quenching model

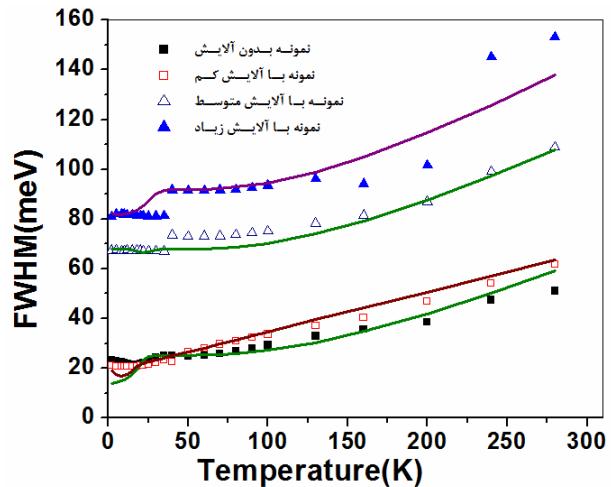
۲. Band tail model

جدول ۲. پارامترهای انتخابی جهت محاسبه پهنهای طیف گسیلی برای نمونه‌های مورد مطالعه.

$\hbar\omega_{LO}$ (meV)	$\gamma_{LO}$ (meV)	$\sigma_A$ (meV/K)	$\Gamma_c$ (meV)	نمونه
۳۵	۱۱۰	۰/۰۰۱۲	۱۱	بدون آلایش
۳۵	۱۲۰	۰/۰۰۱۲	۱۱/۵	آلایش کم
۳۵	۱۳۰	۰/۰۰۱۲	۶۰/۸	آلایش متوسط
۳۵	۱۵۰	۰/۰۰۱۲	۶۶/۵	آلایش زیاد

مقدار کمیت  $\tau_{tr}/\tau_r$  برای تمام نمونه‌ها بزرگ‌تر از یک بوده و در نتیجه زمان انتقال حامل‌ها به حالات جایگزیده کمتر از زمان بازترکیب تابشی می‌باشد و بنابراین حامل‌ها قبل از بازترکیب تابشی به افت و خیزهای پتانسیل متقل می‌گردند.

تغییرات دمایی سطح زیر منحنی طیف گسیلی نمونه‌ها با افزایش دما کاهش می‌یابد (نقاط هندسی در شکل ۵) به طوری که با افزایش مقدار آلایش، خاموش لومینسانس کند شده (تا آلایش متوسط) و سپس تسريع می‌گردد. با قراردادن پارامترهای  $E_a - E_c$ ،  $\sigma$  و  $\tau_{tr}/\tau_r$  مربوط به هر نمونه در رابطه (۱۱) و انطباق این رابطه با داده‌های تجربی، تغییرات دمایی سطح زیر منحنی طیف گسیلی هر نمونه پارامتر  $\tau_{tr}/\tau_r$  به دست می‌آید. این پارامتر برای نمونه‌های بدون آلایش، کم، متوسط و زیاد آلایش یافته به ترتیب  $0/۹۹۸۰$ ،  $۰/۹۹۹۰$ ،  $۰/۹۹۸۵$  و  $۰/۹۹۸۸$  به دست می‌آید. همان‌طوری که قبلاً اشاره شد در نمونه‌هایی که دارای پارامتر  $\tau_{tr}/\tau_r$  کوچک‌تر می‌باشند، خاموشی لومینسانس سریع تر رخ می‌دهد. بنابراین انتظار می‌رود که خاموشی حرارتی لومینسانس به ترتیب سریع بودن برای نمونه‌های بدون آلایش، کم، زیاد-متوسط-آلایش یافته رخ می‌دهد. مقادیر  $\tau_{tr}/\tau_r$  برای اغلب نمونه‌ها نزدیک ۱ بوده و اختلاف ناچیزی دارند و تأثیر این پارامتر روی خاموشی حرارتی لومینسانس نمونه‌ها قابل چشم پوشی است بنابراین پیش‌بینی می‌شود که پارامتر آهنگ انتقال حامل‌ها تأثیر بسزایی روی خاموشی لومینسانس نمونه‌ها داشته باشد به طوری که در نمونه‌های با آهنگ انتقال حامل بیشتر، خاموشی حرارتی لومینسانس سریع تر اتفاق می‌افتد.

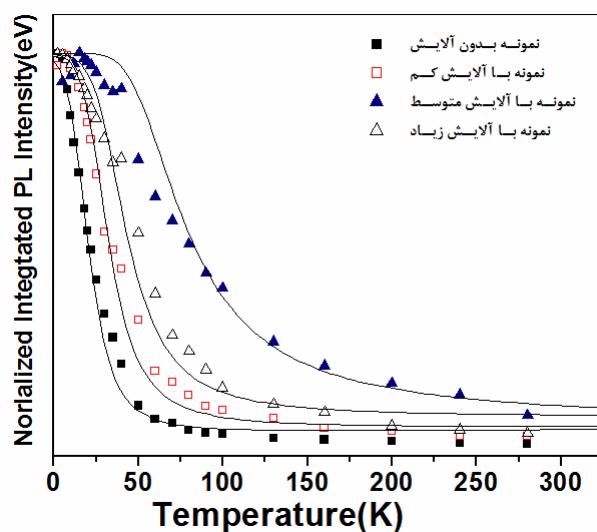


شکل ۴. تغییرات دمایی پهنهای طیف فنولومینسانس نمونه‌های آلایش دار و بدون آلایش (نقاط هندسی معرف داده‌های تجربی بوده و خطوط توپر براساس مدل تئوری LSE و رابطه (۱۰) ترسیم شده است).

$\hbar\omega_{LO}$  در اغلب نیمرساناهای نیتروژن‌دار به ترتیب  $۳۵$  meV/K در نظر گرفته شده است [۱۱ و ۱۲]. تغییرات دمایی پهنهای طیف نمونه‌ها در دمای پایین از رابطه (۱۰) منحرف شده و از پهنهای طیف لومینسانس حالات جایگزیده ( $n(E,T)$ ) ناشی از جایگزیدگی اکسیتون‌ها پیروی می‌کند. خطوط توپر در شکل ۴ نتایج مربوط به پهنهای حاصل از ترکیب رابطه (۱۰) و پهنهای ناشی طیف لومینسانس حالات جایگزیده را نشان می‌دهد. پهنهای طیف گسیلی اغلب نمونه‌ها در دماهای پایین تقریباً ثابت بوده و از دمای  $K = 40$  به بعد یکباره افزایش می‌یابد و از رابطه (۱۰) پیروی می‌کند. پهنهای از مدل LSE برای دماهای پایین به دست می‌آید برای نمونه‌های کم-و-زیاد-آلایش یافته انطباق نسبتاً خوبی داشته و برای نمونه‌های بدون آلایش و متوسط-آلایش یافته انطباقی کمی دیده می‌شود که این عدم انطباق برای نمونه بدون آلایش ناشی از عمق زیاد افت و خیزهای پتانسیل می‌باشد در حالی که در نمونه با آلایش متوسط رفتار خاصی مشاهده شده که با روند کلی تغییرات در نمونه‌های دیگر همانگی لازم را ندارد و در حال حاضر دلیل قانع کننده‌ای برای آن نمی‌توان ارائه داد (شکل ۴).

وجود حالات جایگزینده در چاه کوانتوسومی به دلیل وجود افت و خیزهای پتانسیل در چاه کوانتوسومی و یا در فصل مشترک چاه و سد (تا مقدار آلایش متوسط) و نقایص موجود در ناحیه سد (در آلایش بالا) می‌باشد. تغییرات دمایی طیف گسیلی نمونه بدون آلایش و آلایش دار با کمک مدل حالات جایگزینده (LSE) قابل بررسی بوده و با استفاده از پارامترهای معرفی شده در این مدل مانند  $\tau_r / \tau_{tr}$  ،  $E_a - E$  و  $\sigma$  رفتار دمایی نمونه‌ها به خوبی قابل توصیف است. با توجه به مقدار پارامتر  $E_a - E$  می‌توان رفتار گونه نمونه‌ها را پیش‌بینی کرد به طوری که نمونه بدون آلایش با کمترین  $E_a - E$  و نمونه با آلایش متوسط با بیشترین  $E_a - E$  به ترتیب قوی‌ترین و ضعیفترین رفتار گونه را دارا می‌باشد. پارامتر پهنای چگالی حالات جایگزینده ( $\sigma$ ) با میزان استثمار افت و خیزهای پتانسیل رابطه معکوس دارد یعنی نمونه آلایش یافته نسبت به نمونه بدون آلایش با داشتن کمترین مقدار  $\sigma$  دارای بیشترین استثمار افت و خیزهای پتانسیل هستند. نسبت زمان بازترکیب تابشی به زمان انتقال حامل‌ها برای تمام نمونه‌ها بزرگ‌تر از یک بوده و در نتیجه حامل‌ها قبل از بازترکیب به حالات جایگزینده منتقل می‌گردند. بین پارامترهای ضریب باز به تله افتادن و آهنگ انتقال حامل‌ها، پارامتر اخیر تأثیر بیشتری را روی خاموشی حرارتی لومینسانس نمونه‌ها دارد. این بدان معنی است که نمونه بدون آلایش با بزرگترین آهنگ انتقال حامل و نمونه متوسط آلایش یافته با کمترین آهنگ انتقال حامل به ترتیب دارای سریعترین و کندترین خاموشی حرارتی لومینسانس می‌باشند.

مولفان از آقای پرفسور هیروشی آمانو و همکارانش در دانشگاه میجو ژاپن برای تهیه نمونه‌ها و دکتر لی و همکارانش از دانشگاه هنگ کنگ به خاطر همکاری صمیمانه علمی سپاسگزاری می‌نمایند.



شکل ۵. تغییرات دمایی سطح زیرمنحنی طیف فتولومینسانس نمونه‌های آلایش دار و بدون آلایش ( نقاط هندسی معرف داده‌های تجربی بوده و خطوط توپر با انطباق رابطه  $10^{\circ}$  با داده‌های تجربی و انتخاب مناسب پارامتر  $\sigma$  ترسیم شده است).

به عنوان مثال پارامتر خاموشی بر حسب  $\tau_r / \tau_{tr}$  در دمای  $100\text{ K}$  با توجه به پارامترهای  $\tau_r / \tau_{tr}$  و  $E_a - E$  برای نمونه‌های بدون آلایش ، کم ، متوسط و زیاد آلایش یافته به ترتیب مقادیر  $2/53 \times 10^3$  ،  $4/88 \times 10^3$  ،  $9/95 \times 10^3$  و  $7/92 \times 10^3$  به دست می‌آید. این مقادیر نشان می‌دهد که خاموشی حرارتی لومینسانس نمونه‌ها در دمای  $100\text{ K}$  به ترتیب سریع بودن به صورت زیر می‌باشد : بدون آلایش، کم-، زیاد- و متوسط- آلایش یافته که با داده‌های تجربی (شکل ۵) در توافق است.

با افزایش آلایش در چاه کوانتوسومی چند گانه GaN/AlGaN ابتدا انرژی قله طیف فتولومینسانس به سمت انرژی‌های زیاد و سپس به سمت انرژی‌های کم جابه‌جا می‌شود و همچنین پهنای طیف افزایش و سپس کاهش می‌یابد (در دمای پایین). این روند به علت

1. B Gil, *Group III Nitride Semiconductor Compounds: Physical and Applications*, Oxford Univ. Press, New York (1998).
2. R Hull, R M Osgood, Jr. H Sakaki and A Zunger,

- Iwaya, H Amano and I Akasaki, *Phys. Stat. Sol. (a)* **201** (2004) 2251.
14. H Haratizadeh, P P Paskov, G Pozina, P O Holtz, and B Monemar, *Appl. Phys. Lett.* **80** (2002) 1373.
15. M Gallart, A Morel, T Taliercio, P Lefebvre, B Gil, J Allègre, H Mathieu, N Grandjean, M Leroux, J Massies, *Phys. Stat. Sol. (a)* **180** (2000) 127.
16. F Bernardini, V Fiorentini, and D Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **56**, (1997) R10024.
17. S A Lourenco, I F L Dias, J L Duarte, E Laureto, V M Aquino, and J C Harmand, *Brazilian Journal of Physics* **37** (2007) 1212.
18. Y P Varshni, *Physica* **34** (1967) 149.
19. M Leroux, N Grandjean, B Beaumont, G Nataf, F Semond, J Massies and P Gibart, *J. Appl. Phys.* **86** (1999) 3721.
20. Q Li, S J Xu, M H Xie and S Y Tong, *Euro. Phys. Lett.* **71** (2005) 994.
21. Q Li, S J Xu, W C Cheng, M H Xie, S Y Tong, C M Che and H Yang, *Appl. Phys. Lett* **79** (2001) 1810.
22. Z F Wei, S J Xu, R F Duan, Q Li, J Wang, Y P Zeng and H C Liu, *J. Appl. Phys* **98** (2005) 084305.
23. Z F Wei, S J Xu and Q Li, *J. Appl. Phys* **100** (2006) 124311.
24. J V D Veliadis, J B Khurgin, Y J Ding, A G Cui, and D S Katzer, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 4463.
25. D Curie, *Luminescence in Crystals*, Methuen, London (1963) 206.
26. P G Eliseev, P Perlin, J Lee and M Osi'nski, *Appl. Phys. Lett.* **71** (1997) 569.
3. J Hagen, R D Metcalfe, W Clark, and D Wickenden, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **11** (1978) L143.
4. S Yoshida, S Misawa, and S Gonda, *J. Appl. Phys.* **53** (1982) 6844.
5. I Akasaki, H Amano, K Itoh, H Sakai, T Tanaka and K Manaba, *Inst. Phys. Conf. Ser.* **129** (1992) 851.
6. S Nakamura, T Mukai and M Senoh, *Appl. Phys. Lett.* **64** (1994) 1687.
7. S Nakamura and G Fasol, *The Blue Laser Diode - GaN-Based Light Emitters and Lasers*, Heidelberg: Springer-Verlag (1997).
8. G A Smith, T N Dang, T R Nelson, J L Brown, D Tsvetkov, A Usikov, V Dmitriev, *J. Appl. Phys.* **95** (2004) 8247.
9. J K Gillespie, R C Fitch, N Moser, T Jenkins, J Sewell, D Via, A Crespo, A M Dabiran, P P Chow, A Osinsky, M A Mastro, D Tsvetkov, V Soukhoverev, A Usikov, V Dmitriev, B Luo, S J Pearton, F Ren, *Solid State Electronics* **47** (2003) 1859.
10. M J Manfra, N G Weimann, O Mitrofanov, T Waechtler, D M Tennant, *Phys. Stat. Sol. (a)* **200** (2003) 175.
11. S Chichibu, K Wada, S Nakamura, *Appl. Phys. Lett.* **71** (1997) 2346.
12. T Okimoto, M Tsukihara, K Kataoka, A Kato, K Nishino, Y Naoi and S Sakai, *Phys. Stat. Sol. (c)* **5** (2008) 3066.
13. B Monemar, P P Paskov, H Haratizadeh, J P Bergman, E Valcheva, V Darakchieva, B Arnaudov, T Paskova, P O Holtz, G Pozina, S Kamiyama, M