

بررسی عددی اثر تنش در ساختار نواری لیزر نیمه هادی

آریامنش، سینا؛ باقری، میثم؛ رحیم پور سلیمانی، حمید^۱؛ عربشاهی، هادی^۲

^۱دانشگاه گیلان، خیابان نامجو، دانشکده علوم

^۲گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد.

چکیده

در این مقاله، ما یک مدل ساده برای محاسبه ویژه مقادیر و ویژه بردارهای چاههای کوانتومی $InGaAs/AlGaAs$ و $AlGaAs/GaAs$ ارائه می‌دهیم. در چاه $InGaAs/AlGaAs$ مجبوریم تا اثر تنش را نیز در نظر بگیریم. تنش باعث تغییرات در ساختار نواری می‌شود. تحت یک تنش انقباضی نوار حفره های سنگین به بالای نوار حفره های سبک انتقال پیدا می‌کنند مادامی که تحت تنش انبساطی رفتار سیستم کاملاً برعکس عمل می‌کند. ما این تغییرات را محاسبه کرده ایم.

Numerical Study of Strain Effect on Electronic Band Structures of Semiconductor Lasers

Aryamanesh, Sina ; Bagheri, Meysam ;Rahimpour soleimani, Hamid¹; Arabshahi, Hadi ²

¹ University of Gulan, Science College, Rasht

²Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad

PACS No 78

Abstract

In this article, we present a simple model for computing of eigenvalues and eigenvectors of $InGaAs/AlGaAs$ and $AlGaAs/GaAs$ quantum wells we have to consider effect of strain in $InGaAs/AlGaAs$ quantum wells. Strain is caused changes in band structures. Under a compressive strain the heavy-hole band is raised above the light hole, whereas a tensile strain pushes a light hole above the heavy hole. We have calculated these changes.

مقدمه

برای درک خواص اپتیکی در نیمه رساناها (مانند جذب و بهره ی اپتیکی) در اثر انتقال الکترونیکی دانستن ساختار نوار انرژی و تابع موج متناظر با آن ضرورت دارد.

با محاسبه حالت‌های اولیه و نهایی الکترون ها، با استفاده از قاعده ی پلائی فرمی جذب اپتیکی را محاسبه می‌کنیم. در ابزارهای اپتیکی اکثر نیمه رساناها گاف نواری مستقیم دارند و از

مطالعه ساختار نواری و بهره لیزر نیمرسانا می‌تواند در درک پهنای طیفی پالس، پهنای نواری الایدگی، تقویت و تولید پالس های کوتاه کمک نماید [۱-۳]. طیف سنجی درحد زمانی فمتو ثانیه روشی مناسب و ارزشمند برای مطالعه بنیادی دینامیک غیر تعادلی حامل ها و فرآیندهای با سرعت بالادریزهای نیمرساناست.

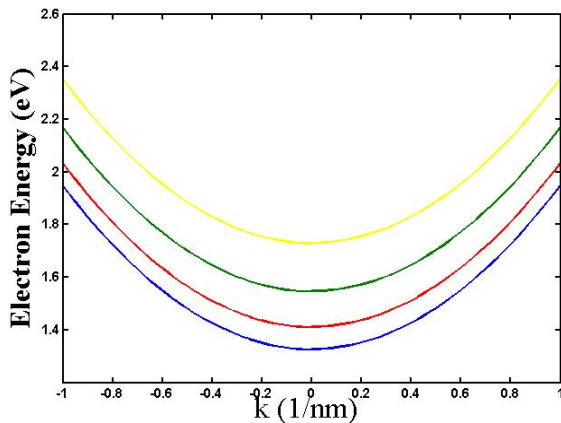
$$\Psi_{n,k}^{\sigma}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} F_{n,k}^{+\frac{1}{2}}(\vec{r}) \left| J = \frac{1}{2}, \sigma = +\frac{1}{2} \right\rangle \\ F_{n,k}^{-\frac{1}{2}}(\vec{r}) \left| J = \frac{1}{2}, \sigma = -\frac{1}{2} \right\rangle \end{pmatrix} \quad (1)$$

که $F_{n,k}^{\sigma}(\vec{r})$ به عنوان تابع پوش می باشد. اگر تنش را در جهت Z در نظر بگیریم آنگاه معادله شرودینگر یک بعدی با کمی تغییر به صورت زیر خواهد شد:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dz^2} - 2C_1 \left[1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right] \varepsilon(z) + V_e(z) \right] F_n(z) = E_n^0 F_n(z) \quad (2)$$

که C_{11} و C_{12} و C_1 تنش در جهت محورهای مختلف است و $V_e(z)$ معرف انرژی پتانسیل الکترون در نوار رسانش است و مقادیر هر یک از ثوابت بالا در جدول شماره ۱ آمده است.

با استفاده از روش تقسیمات جزئی و حل معادله ی ۲ با نرم افزار ساختار باند انرژی نوار بدست آمده است.



شکل ۱: ساختار باند هدایت در چاه کوانتومی InGaAs/AlGaAs در حضور تنش

طرفی بسیاری از اتفاقات فیزیکی در نزدیک لبه ی نواری برای ما حائز اهمیت است. جایی که تئوری $k.p$ بسیار مفید است.

استفاده از مدل کین و هامیلتونی لوتینگر - کوهن

در مدل کین [۴] برای نیمه رساناهای نوار مستقیم با در نظر گرفتن اندرکنش اسپین-مدار به محاسبه ی ساختار نواری می پردازد. چهار نوار **Light** ، **Heavy Hole** ، **conduction** ، **Hole** ، **Spin-Orbit Split-Off** فرض شده است که تبهگنی دوگانه دارند.

برای دستیابی به ویژه مقادیر و ویژه توابع به حل معادله ی شرودینگر ان پرداخته ایم. اگر برهمکنش سایر نوارها را بر روی چهار باند موردنظر در نظر گرفته شود وبا استفاده از این تقریب که سرعت الکترون در مدار اتمی بسیار بزرگتر از سرعت بسته ی موج است و ضمنا با توجه به اینکه انرژی اسپین-مدار InGaAs در حدود چند میلی الکترون ولت است از نوار SO نیز صرف نظر شده است و هامیلتونی 4×4 [5] را در نظر می گیریم. توابع موج را بسط داده و با استفاده از روش اختلال لودوین به حل معادله پرداخته شده است. مزیت این روش این است که به جای حل معادله ی شرودینگر تنها به حل معادله ی ویژه مقداری می پردازد.

حل معادله ویژه مقداری باند هدایت و ظرفیت چاه کوانتومی InGaAs / AlGaAs در حضور تنش

برای محاسبه ماتریس گذار، در ابتدا می باید ساختار نواری چاه کوانتومی را محاسبه نمود. برای نوار رسانش، ما از تقریب معادله شرودینگر با جرم موثر استفاده نموده ایم. قسمت دوره ای تابع موج بلوخ را نیز به صورت S گونه $(|1/2; \pm 1/2\rangle)$ در نظر گرفته ایم. با توجه به تبهگنی، تابع موج باند هدایت به صورت زیر خواهد بود:

$$\begin{aligned}
 P &\equiv E_v + \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m} \left(k_x^2 + k_y^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \\
 &\quad + a_v \left[\varepsilon_{xx}(z) + \varepsilon_{yy}(z) + \varepsilon_{zz}(z) \right] \\
 Q &\equiv \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m} \left(k_x^2 + k_y^2 + 2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \\
 &\quad - \frac{b}{2} \left[\varepsilon_{xx}(z) + \varepsilon_{yy}(z) - 2\varepsilon_{zz}(z) \right] \\
 R &\equiv \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\sqrt{3}\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) + i2\sqrt{3}\gamma_3 k_x k_y \right) \\
 &\quad + \frac{b}{2} \sqrt{3} \left[\varepsilon_{xx}(z) - \varepsilon_{yy}(z) \right] - i \frac{d}{2} \varepsilon_{xy}(z)
 \end{aligned} \tag{5}$$

γ_1 ، γ_2 و γ_3 را بعنوان پارامترهای ساختار نواری یا ضرایب لوتینگر - کوهن می شناسیم که مقادیر آن در جدول شماره ۲ آمده است و a_v, b, d پارامترهای تغییر شکل می باشند که برای مواد مختلف مقادیر متفاوتی دارند [7].

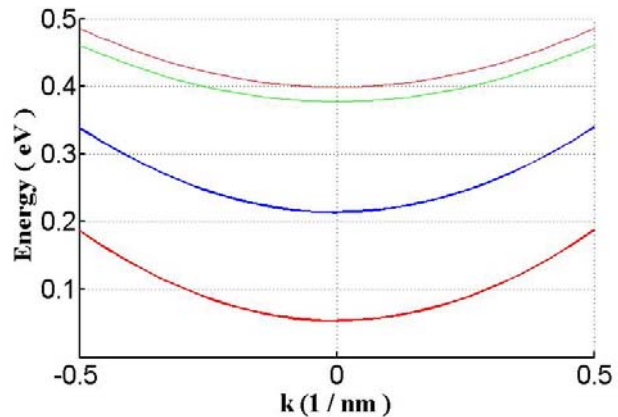
ثابت	dyn / cm^2
c_{11}	1.1418e+12
c_{12}	5.2690e+12
c_{13}	0.6667

جدول ۱: مقادیر پتانسیل تغییر شکل

	γ_1	γ_2	γ_3
GaAs	6.85	2.1	2.9
InAs	20.4	8.3	9.1

جدول ۲: مقادیر ضرایب لوتینگر

با توجه به ساختار متقارن چاه مورد مطالعه با قطری کردن H^U می توان ساختار نواری حفره ها را بدست آورد. شکل ۳ و ۴ به ترتیب ساختار نوار ظرفیت InGaAs/AlGaAs و AlGaAs/GaAs را نشان می دهد. همانطور که از شکل مشخص است وجود تنش باعث جابجایی ترازها شده است به



شکل ۲: ساختار باند هدایت در چاه کوانتومی AlGaAs/GaAs بدون حضور تنش

همانند نوار رسانش؛ تابع موج باند ظرفیت را بدون در نظر گرفتن برهمکنش Spin-Orbit نیز بدست آورده شده است. حالت های بلوخ حفره در نقطه گاما به شکل P می باشند. برای محاسبه حالت های حفره ما از روش هامیلتونی لوتینگر-کوهن [6] استفاده می کنیم. که هامیلتونی آن عبارتست از:

$$H = \begin{bmatrix} H^U & 0 \\ 0 & H^L \end{bmatrix} \tag{3}$$

و هر بلوک آن بصورت زیر می باشد.

$$H^{U(L)} = - \begin{bmatrix} P + Q - V_h & R \\ R^\dagger & P - Q - V_h \end{bmatrix} \tag{4}$$

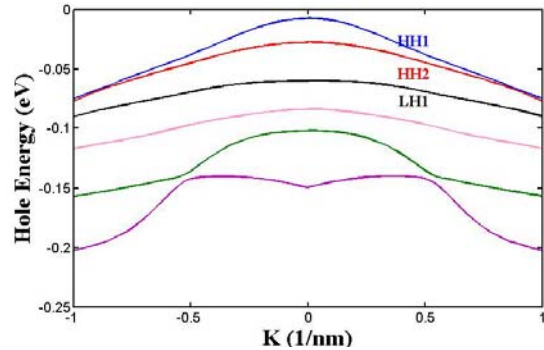
که V_h پتانسیل حفره ها می باشد که به سمت پایین منفی در نظر گرفته شده است. با توجه به ساختار متقارن چاه مورد مطالعه با قطری کردن H^U می توان ساختار نواری حفره ها را بدست آورد. بقیه ترم های هامیلتونی به صورت زیر می باشند.

با مقایسه ی شکل‌های ۱ و ۲ که مرتبط به باند هدایت دو ماده می باشد ؛ تنش موجب تغییر دادن انرژی های زیرباندهای نوار رسانش شده است اما با مقایسه ی شکل‌های ۳ و ۴ بوضوح می توان دریافت که ایجاد تنش در نیمه رسانای چاه کوانتومی تغییرات عمده ای در ساختار نوازی باند ظرفیت ایجاد می کند به نحوی که مکان زیرباندهای LH1 و HH2 را تغییر داده و در واقع جهش زیر باند LH1 را شاهد هستیم.

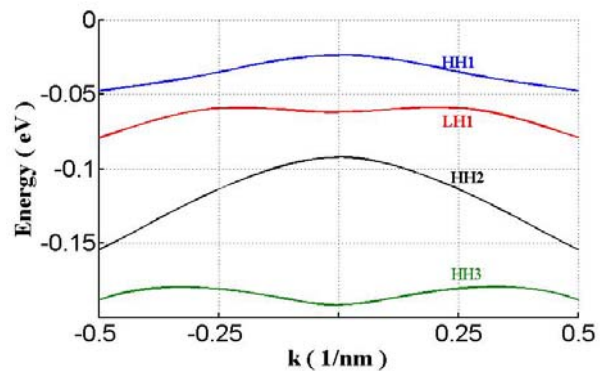
مرجع‌ها

- [1] C. Johnson and A. Mooradian, *Appl. Phys. Lett*, **49**, p. 8539-8558, 1986.
- [2] M. Wiesenfeld, R. S. Tucker and M. Downey, *Appl. Phys. Lett.* **51**, 1307, 1987.
- [3] J. Pipreck, 'Semiconductor Optoelectronic Devices', Academic Press, 2003.
- [4] J. M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev. Lett.*, **65**, p. 869-883, 1955.
- [5] A. F. J. Levi "Applied Quantum Mechanics", Cambridge University press, 2006
- [6] W. W. Chow and S. W. Koch, 'Semiconductor-laser Fundamental', Springer, 1999.
- [7] G. D. Sanders, C. K. Sun, J. G. Fujimoto, H. K. Choi, C. A. Wang and C. J. Stanton, *Phys. Rev. B*, **50**, 12, 1994.

گونه ای که دیگر رفتار نوارها در حضور تنش شبیه به حالت بدون تنش نمی باشد.



شکل ۳: ساختار باند ظرفیت در چاه کوانتومی InGaAs/AlGaAs در حضور تنش



شکل ۴: ساختار باند ظرفیت در چاه کوانتومی AlGaAs/GaAs در حضور تنش

نتیجه گیری

در این مقاله به بررسی ساختار نوار ظرفیت چاه کوانتومی با استفاده از هامیلتونی لوتینگر پرداختیم. نتایج، ترکیب شدن حالت های حفره سبک و سنگین را در خارج از مرکز بریلوین به خوبی نشان می داد. این ترکیب شدن باعث پیدایش ناهمسانگردی هایی در ساختار نوازی بخصوص نوار ظرفیت می گردد.