

اثر تنش در لایه های نازک رونشتی نازک

مهدی اسکویی (استادیار)

چکیده

در رشد لایه های نازک نیمه هادی و استفاده آنها در صنعت لیزرهای نیمه هادی بدلیل ناخوانا بودن ثابت شبکه های بلوری در لایه های رشد داده شده، تنش و کشش ایجاد می شود که خود باعث تغییر ساختار باندها و زیر باندهای انرژی در بلور نیمه هادی می گردد. برای محاسبه باندها و زیر باندها از اثر جفت شدگی ارییت-ارییت برای زیر باندهای حفره-سنگین (HH) و حفره-سبک (LH) ظرفیت صرف نظر نکرده ایم؛ اما از اثر جفت شدگی اسپین-ارییت دو زیر باند ذکر شده با زیر باند شکافتی در $k=0$ چشم پوشی کرده ایم؛ زیرا انرژی شکافتی بین این باند و باندهای دیگر در حدی است که در فرایندهایی مانند بهره در لیزرهای نیمه هادی شرکت نمی کند و یا نقش بسیار کوچکی دارد.

مقدمه

رشد به صورت اپیتکسی لایه های نیمه هادی، کلیدی برای گوناگونی قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی می باشد که در گذشته فقط به موادی که دارای ثابت های شبکه یکسانی بودند محدود می شد؛ زیرا تنش و جابجاشدگی مربوط به ناخوانایی ثابت های شبکه بلوری باعث نقص در کارکرد این قطعات بود. اما اخیراً دانشمندان و مهندسان متوجه این نکته شده اند که تنش می تواند وسیله ای قدرتمند برای تغییر ساختار باند های نیمه هادی جهت بهینه کردن مشخصات قطعات نیمه هادی و لیزر های نیمه هادی باشد [۱]. به عنوان مثال می توان توسط تنش با تغییر ساختار زیر باندهای ظرفیت، جرم موثر را در باند ظرفیت کاهش داد. بنابراین چگالی حالت ها نیز در بیشینه باند ظرفیت کاهش یافته و به تبع چگالی حامل هایی که برای رسیدن به حالت آستانه در لیزر های نیمه هادی نیاز است و نیز چگالی جریان آستانه کاهش می یابد [۲].

تنش دو اثر بسیار مهم روی باند های انرژی دارد: الف-مولفه همسانگرد تنش یا مولفه هیدرواستاتیکی آن، $\mathcal{E}_H$ ، باعث انتقال باند هدایت و زیر باندهای ظرفیت به انرژی های بالاتر می گردد و به تبع گاف انرژی را بزرگتر می کند. ب-مولفه ناهمسانگرد تنش و یا مولفه پیچشی آن، $\mathcal{E}_S$ ، تبهگنی دو باند ظرفیت HH و LH را در $k=0$ برمی دارد که مهمترین اثر تنش، همین اثر دوم است [۳]. هدف از این مقاله محاسبه زیر باندهای انرژی ظرفیت برای نیمه هادی $In_xGa_{1-x}As/InP$ در دو حالت تنش و غیر تنش بر اساس هامیلتونی معرفی شده توسط "لوتینگر" و "کوهن" می باشد [۲]. در این مقاله از محاسبه تغییرات در باند هدایت صرف نظر کرده ایم؛

زیرا تنش فقط باعث انتقال این باند به انرژی های بالاتر می گردد. در اینجا از تنش دو محوری استفاده کرده ایم که جهت آن در راستای رشد بلور، محور Z ها می باشد و با استفاده از محاسبه ویژه مقادیرهای هامیلتونی، ساختار باندهای انرژی را توسط رسم آنها بر حسب بردارهای موج $\vec{k}_z$ و $\vec{k}_t$ ، برای ماده ذکر شده نشان داده ایم که $\vec{k}_z$ بردار موج در راستای رشد بلور و $\vec{k}_t$ برداری دو بعدی در صفحه عمود بر راستای رشد بلوری می باشد.

باید ذکر کرد که جهت محاسبات ریاضی از نرم افزار Mathematica، نسخه 5.0 استفاده شده است.

هامیلتونی زیر باندهای انرژی

هر باند انرژی، از ترازهای انرژی اتمهایی که بلور را تشکیل داده اند، ایجاد شده است. باند هدایت باقی مانده یک اربیتال S اتمی و سه باند ظرفیت HH و LH و شکافتی در $k=0$ (SO) باقی مانده اربیتالهای P اتمی اند [۴] و از حالت های $P_{3/2}$ و $P_{1/2}$ اتمهای آزاد بدست آمده اند. تراز $P_{3/2}$ دارای تبهگنی چهارگانه است و به مقادیرهای $m_j = \pm 1/2, \pm 3/2$ مربوط می شود و تراز انرژی حفره های HH و LH را می سازد. تراز $P_{1/2}$ با $m_j = \pm 1/2$ به طور دو گانه تبهگن بوده و تراز انرژی حفره های SO را می سازد [۴]. توابع بلوخ هر یک از این اربیتالها u_s و u_x و u_y و u_z است. توابع بلوخی برای باندهای ظرفیت، u_{hh} و u_{lh} تعریف می کنیم که به صورت ترکیبی خطی از توابع بلوخ پایه u_x و u_y و u_z می باشد [۵-۶]. هامیلتونی برای یک لایه نیمه هادی غیر تنشی عبارت است از

$$H = - \begin{pmatrix} P+Q & -S & R & 0 \\ -S^* & P-Q & 0 & R \\ R^* & 0 & P-Q & S \\ 0 & R^* & S^* & P+Q \end{pmatrix} \quad (1)$$

که در آن [۷]

$$P = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right) \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (2-a)$$

$$Q = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right) \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \quad (2-b)$$

$$R = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right) \sqrt{3} [\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y] \quad (2-c)$$

$$S = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right) 2\sqrt{3} \gamma_3 (k_x - ik_y) k_z \quad (2-d)$$

در روابط بالا $\vec{k}$ به صورت عملگر $-i\vec{\nabla}$ تعریف می گردد. γ_1 و γ_2 و γ_3 پارامترهای لوتینگراند و به جرمهای موثر HH و LH مربوط می گردند [۳]. γ_3 مربوط به ناهمگنی جرم موثر در جهات مختلف در فضای k می باشد. همچنین فرض می کنیم که $k_x^2 + k_y^2 = k_t^2$ و $\vec{k}_t - i\vec{k}_y$ برداری مختلط به صورت $\vec{k}_x - i\vec{k}_y$ می باشد.

تنش در فرم ریاضی

تنش ε به صورت تغییر نسبی در طول، بوسیله اعمال فشار σ ، تعریف می گردد و برابر است با $\Delta l / l_0$ که در آن l_0 طول اولیه و Δl تغییر در طول می باشد. اگر ماده ای تحت کشش به صورت الاستیکی رفتار کند، داریم

$$\sigma = E\varepsilon \quad (3)$$

که رابطه بالا همان قانون هوک است و E مدول یانگ می باشد. قانون عمومی هوک به صورت زیر می باشد:

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (4)$$

c_{ijkl} ، ثابتهای سختی اند.

اگر یک تنش دو محوری در جهت (۰۰۱) داشته باشیم ($\sigma_3 = 0, \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = m$)، داریم [۸]

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m \\ m \\ \varepsilon_3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

ساختار باندهای انرژی تنشی و غیر تنشی

در اینجا از یک تنش دو محوری در جهت (۰۰۱) استفاده کرده ایم و مولفه های تنش عبارتند از [۹]

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_0 - a}{a} \quad (6-a)$$

$$\varepsilon_{zz} = -2c_{12}\varepsilon_{xx} / c_{11} \quad (6-b)$$

$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0 \quad (6-c)$$

که a_0 ثابت شبکه زیر لایه و a ثابت شبکه ماده رشد داده شده می باشد. در این حالت هیچگونه فشار تک محوری

خارجی نداریم ($\sigma_1 = \sigma_2 = 0$). جمله هایی که تحت

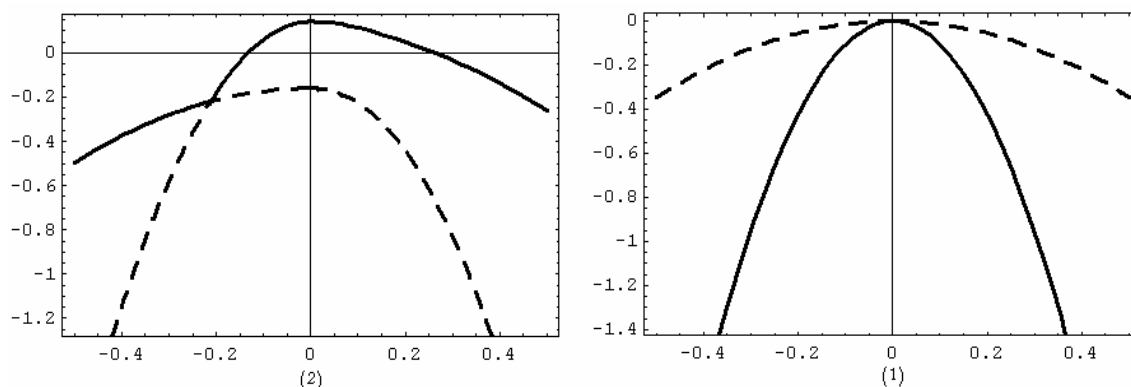
اعمال تنش به هامیلتونی (۱) اضافه می شوند، عبارت اند از [۹]

$$P_\varepsilon = -a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (7)$$

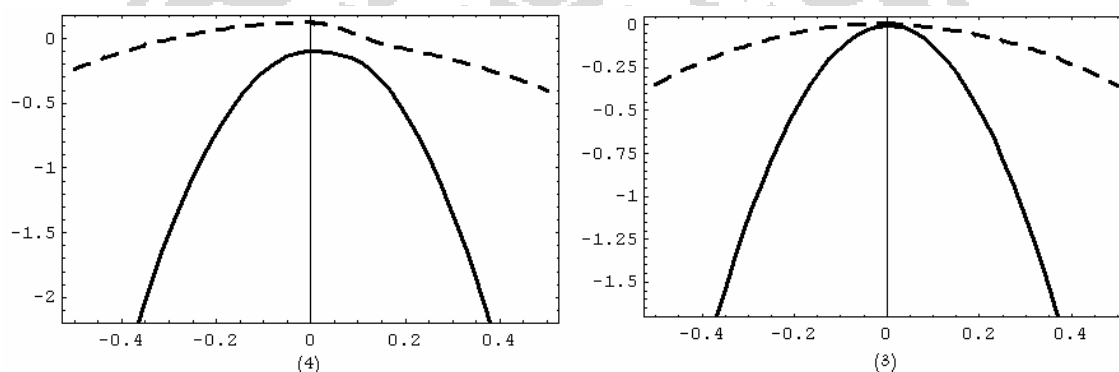
که به جمله P اضافه می شود و

$$Q_\varepsilon = -b/2(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (8)$$

که به جمله Q اضافه می شود. در روابط بالا a_v و b پتانسیل های تغییر شکل "یر- پیرکوس" می باشند [۲].



شکل ۱: نمودار باندهای انرژی $In_xGa_{1-x}As$ غیر تنش با $x=0.4$ شکل ۲: نمودار باندهای انرژی $In_xGa_{1-x}As$ تنش به صورت کشیده با $x=0.2$



شکل ۳: نمودار باندهای انرژی غیر تنش با جمله های تنش در هامیلتونی با $x=0.55$ شکل ۴: نمودار باندهای انرژی $In_xGa_{1-x}As$ تنش به صورت فشرده با $x=0.8$

در شکل های ۱ الی ۴ نمودار باندهای انرژی $In_xGa_{1-x}As$ کشیده شده است. x درصد آلایند In می باشد. در اینگونه از مواد که به صورت ترکیبی از عناصر با درصد های مختلف اند، مقدار آلایند ها خود منشا تنش در بلور خواهد بود. نشان خواهیم داد که برای مقداری از In و با وجود جمله های تنش در هامیلتونی، نیمه هادی غیر تنش داریم. برای مقادیر دیگر، تنش فشرده و یا تنش کشیده خواهیم داشت. در تمام نمودارها منحنی های خط چین باند HH و منحنی های خط پر باند LH را نشان می دهند. شکل ۱ که نیمه هادی غیر تنش و بدون جمله های تنش در هامیلتونی داریم، $x=0.4$ می باشد. مشاهده می کنیم دو باند کاملاً تبهگن اند و بیشینه باند در $k=0$ قرار دارد و باندها در دو جهت k_x و k_y کاملاً متقارنند. در شکل ۲ با $x=0.2$ نیمه هادی به صورت کشیده تنش می باشد. می بینیم که باند LH بالا تر از باند HH قرار گرفته است. در این حالت جرم حفره های HH و LH نسبت به حالت غیر تنش خود تغییر می کنند و باند LH فعالیت بیشتری در فرایندهایی نظیر بهره و گسیل القایی دارد. در شکل ۳ با $x=0.55$ نیمه هادی با وجود جمله های تنش در هامیلتونی، دوباره به حالت غیر تنش تبدیل شده است و باند HH دوباره بالای باند LH قرار دارد. در شکل ۴ با $x=0.8$ تنش فشرده داریم و باند ها دیگر تبهگن نمی باشند و باند HH دوباره بالای باند LH قرار دارد. در تمامی شکل های ۱ الی ۴ بیشینه باند

انرژی همچنان در $k=0$ قرار دارد. تمام مقادیر مورد نیاز برای محاسبه ویژه انرژی های هامیلتونی 2 در [۳ و ۱۰] آمده است. مقادیر مورد نیاز برای $In_xGa_{1-x}As$ از قبیل c_{11} و c_{12} و a_v و b از میانگین مقادیر GaAs و InAs بدست آمده است.

نتیجه گیری

با توجه به نمودارهای رسم شده می توان دید که تنش، ساختار باندهای انرژی را تغییر می دهد. بدین صورت که تبهگنی دو باند HH و LH را از بین برده و همچنین سطح انرژی حفره ها را بالاتر می برد. در نیمه هادی های غیر تنشی بدلیل تبهگن بودن باندهای انرژی هر دو نوع حفره وارونگی جمعیت را تجربه می کنند و هر دو باند تقریباً به طور مساوی در چگالی جریان مستقیم شرکت می کنند و خود باعث افزایش چگالی حاملها و جریان آستانه می گردد [۱۱]. بنابراین با داشتن تنش می توانیم گسیل القایی و بهره را به صورت کاملی ناهمسانگرد کنیم. در کل با تغییر ساختار باندهای انرژی، جرم موثر حفره در دو جهت k_x و k_z تغییر کرده و به تبع چگالی حالتها را تغییر می دهد. با تغییر چگالی حالتها، چگالی حاملها و چگالی جریانی که برای حالت آستانه در لیزرهای نیمه هادی نیاز است، تغییر می کند. حال اگر بتوانیم با استفاده از تنش و درصدهای مختلفی از مواد در ترکیبات نیمه هادیهای از قبیل $In_xGa_{1-x}As$ ، جرم موثر حفره را کاهش دهیم، به تبع چگالی حاملها و جریان آستانه کمتری برای لیزرهای نیمه هادی نیاز خواهد بود که خود باعث بهینه شدن بهره در این نوع لیزرها می شود.

منابع

1. Yablanvitch, E., and Kane, E.O., 1986, IEEE J. Lightwave Technol. LT, 4, 504
2. Chuang, S.L., and Chao, C.Y., 1991, "spin-orbit-coupling effects on the valance-band structure of strained semiconductor QWs", Phys. Rev B, 46, 7
- [3] : Zory, Jr., and Peter, S., 1993, "Quantum Well Lasers", Academic Press, INC.
- [4] : Kittel, c., 1983, "Introduction To Solid State Physics", Wiley Eastern Limited
- [5] : Kane, E.O., 1956, J. Phys. Chem. Solids, 1, 82
- [6] : Luttinger, J.M., and Kohn, W., 1955, Phys. Rev, 97, 869
- [7] : Chuang, S.L., and Chang, C.S., 1995, "modeling of strained QW lasers with spin-orbit coupling", IEEE J. quantum electronics, 1, 2
- [8] : Nye, J.F., 1985, "physics properties of crystals", Oxford university press
- [9] : Ohtoshi, T., and Niwa, A., 1995, "orientation dependence in long wavelength strained QWs", IEEE J., quantum electronics, 1, 2]
- [10] : Van De Walle, C.G., 1988, "band lineups and deformation potentials in the model solid theory", Phys. Rev B, 39, 3
- [11] : Haug, A., 1987, "relation between the T0 values of bulk and quantum well GaAs", Appl. Phys. B, 44, pp: 151-153