



دانشکده فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

نانوفیزیک

سنتز و بررسی خواص اپتیکی نانوسیم‌های
نیتريد آلومینیوم (AIN)

دانشجو: آذین عقدائی

استاد راهنما:

دکتر حمید هراتی‌زاده

بهمن ۱۳۸۹

تقدیم به:

پدرم

که فروزش مهرش، زندگی ام را روشنی بخشیده است.

مادرم

که خلاصه تمام خوبیهاست.

همسرم

به پاس مهربانی های بی دریغش

و

بهرود کوچک

که تولدش نوید امید و زندگیست.

باسپاس و تشکر

از راهنمایی‌ها و حمایت‌های بی‌دریغ استاد بزرگوار و ارجمندم

جناب آقای دکتر حمید هراتی‌زاده

که در محضرشان کسب علم و معرفت نمودم.

چکیده

هدف ما در این پایان‌نامه سنتز و بررسی ویژگی‌های اپتیکی و بهینه‌سازی گسیل اپتیکی نانوسیم‌های نیتريد آلومینیوم (AlN) بدون آرایش و با آرایش فلزات واسطه به منظور تولید رنگ‌های اصلی طیف مرئی است. سنتز نانوساختارهای یک بعدی AlN با استفاده از روش نیتروژن‌دهی مستقیم در کوره الکتریکی سه منطقه‌ای به صورت موفقیت‌آمیز انجام شد. نمونه‌ها در شرایط متفاوتی از جمله شرایط دمایی مختلف، درصد‌های متفاوتی از مواد اولیه، شار متغیر گاز حامل و فعال، تغییر در میزان و نوع آرایش سنتز شده‌اند. نتایج سنتز نمونه‌ها با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان (FE-SEM) مطالعه شده است. این نتایج نشان می‌داد که با تغییر شرایط رشد، نانوساختارهای متفاوتی سنتز شده است. نمونه‌ها در دو دسته کلی بدون آرایش و آرایش یافته با فلزات واسطه‌ی مس و منگنز سنتز شدند. گسیل اپتیکی نمونه‌ها به روش فوتولومینسانس در دمای اتاق با استفاده از طول موج‌های تحریکی ۳۶۰ nm و ۳۲۵ nm حاصل از لامپ UV و لیزر He-Cd مطالعه شده است. نتایج، گسیل خوبی در دمای اتاق در سه ناحیه آبی، سبز و قرمز به ترتیب از نمونه‌های بدون آرایش، آرایش یافته با مس و منگنز را نشان می‌دهد. این گسیل‌ها به ناکاملی‌هایی از جمله تهی‌جای نیتروژن، ناخالصی‌های اکسیژن و ترازهای عمیقی که توسط فلزات واسطه در گاف نواری AlN ایجاد می‌شوند نسبت داده شده است. به منظور بهینه‌سازی گسیل اپتیکی، نمونه‌ها در شرایط متفاوتی بازپخت شدند. نتایج فوتولومینسانس نشان می‌دهد که بازپخت نمونه‌ها به مدت ۳۰ دقیقه در حضور گاز نیتروژن و یا به مدت ۶۰ دقیقه تحت جریان گاز Ar شدت نور گسیلی را به طور چشم‌گیری افزایش می‌دهد.

مقدمه

نیتريد آلومينيوم (AlN) به عنوان يك نيم رساناي III-V با گاف انرژی پهن ($6/2 \text{ eV}$) به عنوان ماده‌ای فعال در قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی مانند قطعات نورگسیل شناخته شده است. علی‌رغم گاف انرژی پهن AlN در حالت حجمی، پیش‌بینی می‌شود که نانو ساختارهای یک‌بعدی این ماده به دلیل حضور ترازهای عمیق در گاف انرژی آن قادر به گسیل مریبی با شدت زیاد در دمای اتاق بوده و پتانسیل کاربری بالایی را در صنایع اپتوالکتریکی دارا می‌باشد. علاوه بر خواص اپتیکی نیتريد آلومينيوم، این ماده دارای خواص منحصر به فرد دیگری از جمله هدایت گرمایی بالا، ضریب انبساط گرمایی پایین، پاسخ پیزوالکتریک بالا، انعطاف مکانیکی بالا و پایداری گرمایی و شیمیایی می‌باشد. نمونه‌های سنتز شده در این پایان نامه به منظور استفاده در صنایع اپتوالکترونیکی رشد داده شده‌اند و علت اینکه نانو ساختارهای AlN سنتز شد این است که در اثر محدودیت کوانتومی در نانو ساختارها، توابع موج الکترون و حفره هم‌پوشانی بیشتری نسبت به حالت حجمی از خود نشان می‌دهند که این امر منجر به افزایش احتمال باز ترکیب الکترون و حفره و کاهش زمان باز ترکیب آنها شده و در نتیجه توان نوری قطعه را بالا می‌برد.

در این پایان‌نامه نانو ساختارهای AlN در دو دسته‌ی کلی بدون آرایش و آرایش یافته با مس و منگنز در شرایط متفاوتی سنتز شده‌اند. سنتز این نمونه‌ها به روش CVD در کوره‌الکتریکی تیوبی در آزمایشگاه رشد بلور و نانوفیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود انجام شده است. مطالعات ساختاری نانو ساختارهای سنتز شده توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی (FESEM-Hitachi S-4160) در دانشکده‌ی برق دانشگاه تهران انجام شد. اندازه‌گیری‌های اپتیکی به روش فوتولومینسانس در دمای اتاق، با استفاده از لامپ UV و لیزر He-Cd در دانشگاه صنعتی شریف انجام شد. داده‌های تجربی حاصل از اندازه‌گیری‌های اپتیکی توسط نرم‌افزارهای Origin و PeakFit مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته و نتایج فیزیکی به دست آمده از تحلیل داده‌ها مورد بحث و بررسی قرار گرفته است.

این پایان‌نامه شامل پنج فصل و دو پیوست است: فصل اول مربوط به آشنایی کلی با نیم رساناهای نیتروژندار، خواص و کاربردهای آنها می‌باشد. فصل دوم به ساختارهای کوانتومی نیم رساناها، خواص و روش‌های سنتز سیم‌های کوانتومی اشاره می‌کند. در فصل سوم مکانیسم گسیل اپتیکی در ساختارهای حجمی و نانو ساختارهای AlN را مورد بررسی قرار داده و به مقایسه آنها می‌پردازیم. در فصل چهارم نتایج حاصل از سنتز نانو ساختارها با شرایط متفاوت رشد، به همراه

تصاویر SEM ساختارهای سنتز شده مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است و در فصل پنجم مطالعات اپتیکی نمونه‌ها به روش فوتولومینسانس و اثر بازپخت بر خواص اپتیکی نانوساختارهای AlN مورد بحث و بررسی قرار گرفته است. پیوست (الف) مربوط به معرفی سیستم سنتز نمونه‌ها است. پیوست (ب) شامل مقالات علمی حاصل از پایان‌نامه است که شامل یک مقاله‌ی ژورنالی ارسال شده و سه مقاله‌ی کنفرانسی شامل دو کنفرانس بین‌المللی و یک کنفرانس داخلی است که عبارتند از:

[1] "FORMATION AND CHARACTERIZATION OF ALUMINUM NITRIDE NANOWIRES, GROWTH BY CHEMICAL VAPOUR DEPOSITION (CVD) METHODE", *Azin Aghdaie, Hamid Haratizadeh*, International Congress of Nanoscience and Nanotechnology (ICNN2010), Nov. 9-11, 2010, shiraz-Iran.

[2] " Investigation of photoluminescence mechanism of AlN nanowires with different dopant ", *Azin Aghdaie, Hamid Haratizadeh*, Accepted in Advanced In Applied Physics and Material Science (APMAS2011) confrence, May 12-15 , 2011. , Antalya, Turkey.

[۳] اثر آرایش با فلزات واسطه بر خواص اپتیکی نانوسیم‌های نیتريد آلومینیوم. آذین عقدایی، حمید هراتی‌زاده. هفدهمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران، ۲۱-۱۹ بهمن، سال ۱۳۸۹، کرمان، ایران.

[4] "Effects of Annealing on Photoluminescence Properties of Cu Doped AlN Nanowires", *Azin Aghdaie, Hamid Haratizadeh*, submitted in journal of Nanotechnology.

قدردانی و تشکر

سپاس خدای یکتا را که در تمام مراحل زندگی مرا یاری نمود و به من نیروی تلاش و همتی عطا فرمود تا این مرحله از زندگی را با موفقیت به اتمام برسانم. از پدر و مادر عزیزم که در تمام این مدت یار و یاور و مشوق من بودند کمال تشکر و قدردانی را دارم. بدون شک اگر صبر و مهربانی مادرم، حمایت‌های بی دریغ پدرم، دلگرمی‌ها و پشتیبانی‌های همسر و همدلی برادر و خواهرم نبود هیچ یک از این امور میسر نمی‌شد.

در این جا لازم می‌دانم از تمام کسانی که مرا در این راه یاری نموده‌اند قدردانی و تشکر داشته باشم. خصوصاً از استاد راهنمای بزرگوارم جناب آقای دکتر حمید هراتی‌زاده که با کمک‌ها و راهنمایی‌های بی دریغ خود در تمام مراحل تدوین این مجموعه مرا یاری نموده‌اند، بسیار سپاسگذارم و موفقیت روزافزون ایشان را در تمام مراحل زندگی از خداوند متعال خواستارم. از آقایان دکتر محمد باقر رحمانی و دکتر محمد مهدی باقری محققى که قبول زحمت نموده‌اند و داوری این پایان نامه را بر عهده گرفته‌اند، تشکر و قدردانی می‌کنم. هم‌چنین از کارشناس محترم آزمایشگاه جناب آقای رضا مسکنی کمال تشکر را دارم. در پایان لازم می‌دانم از تمامی دوستان و همکارانم خصوصاً خانم‌ها : فاطمه رجب‌زاده مطلق، زهرا مرزبان، زهرا آزادواری، صغری رستمی و آقایان محمدمین غروی و یاسر ارجمند که در این مدت در کار پایان نامه مرا یاری نموده‌اند تشکر کنم و موفقیت روزافزونشان را از درگاه ایزد منان خواستارم.

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فصل اول : آشنایی با نیمرساناهای نیتروژندار

۲-۱-۱	مقدمه	۲
۲-۱-۲	ساختار نواری نیم رساناها	۲
۳-۱-۳	نیم رساناهای نیتروژندار	۳
۴-۱-۴	ساختار بلوری نیم رساناهای نیتروژندار	۵
۵-۱-۵	روشهای رشد نیم رساناهای نیتروژندار	۷
۸-۱-۵-۱	برآرایی باریکه مولکولی (MBE)	۸
۹-۱-۵-۲	لایه نشانی شیمیایی در فاز بخار	۹
۱۱-۱-۶	زیر لایه مناسب برای سنتز نیم رساناهای نیتروژندار	۱۱
۱۲-۱-۷	GaN	۱۲
۱۳-۱-۸	AlN	۱۳
۱۵-۱-۶	InN	۱۵

فصل دوم : نانو ساختارهای نیمرسانا

۱۷-۱-۲	چاه کوانتومی، سیم کوانتومی و نقاط کوانتومی	۱۷
۱۹-۲-۲	چگالی حالتها	۱۹
۲۱-۳-۲	ساختار، خواص و کاربردهای سیم های کوانتومی	۲۱
۲۱-۳-۲-۱	مقدمه	۲۱

۲۲ ساختار نانوسیم ها ۲-۳-۲
۲۲ سازوکارهای های رشد نانو سیم های نیم رسانا ۳-۳-۲
۲۲ ۱- بخار- مایع - جامد (VLS) ۲-۳-۲
۲۴ ۲- روش بخار- جامد (VS) ۲-۳-۲
۲۴ ۳- روش الکتروشیمیایی ۲-۳-۲
۲۵ ۴- رشد محلولی ۲-۳-۲
۲۵ کاربرد های نانوسیم های نیم رسانا ۴-۳-۲
۲۵ ۱- کاربردهای الکتریکی ۴-۳-۲
۲۶ ۲- کاربردهای اپتیکی ۴-۳-۲
۲۸ ۳- کاربردهای مغناطیسی ۴-۳-۲

فصل سوم : گسیل اپتیکی نیتريد آلومینیوم

۳۰ ۱- مقدمه ۳-۳
۳۰ ۲- گسیل اپتیکی از ساختارهای حجمی AIN ۳-۳
۳۳ ۳- گسیل اپتیکی از نانو ساختارهای AIN ۳-۳
۳۷ ۴- مقایسه گسیل اپتیکی در نانو ساختارها و ساختارهای حجمی AIN ۳-۳

فصل چهارم : نتایج حاصل از سنتز نانو ساختارهای نیتريد آلومینیوم

۴۱ ۱- مقدمه ۴-۴
۴۱ ۲- نتایج حاصل از سنتز نانو ساختارهای AIN با شرایط متفاوت ۴-۴
۵۲ ۳- نتیجه گیری ۴-۴

فصل پنجم : نتایج حاصل از بررسی گسیل اپتیکی در نانوساختارهای بدون آرایش و آرایش یافته AIN

۵-۱	مقدمه	۵۵
۵-۲	بررسی مکانیسم گسیل اپتیکی در نانوساختارهای سنتز شده بدون آرایش	۵۷
۵-۳	بررسی ساز و کار گسیل اپتیکی در نانوساختارهای آرایش یافته با فلزات واسطه	۵۹
۵-۴	نتیجه گیری	۶۶
۶۷	مراجع	۶۷
۷۲	پیوست (الف)	۷۲
۷۷	پیوست (ب)	۷۷

فهرست شکل‌ها

شکل	صفحه
شکل ۱-۱: شکافتگی ترازهای انرژی E1 و E2 بر اثر برهمکنش بین‌اتمی.....	۳
شکل ۲-۱: نمودار گاف انرژی بر حسب پارامتر شبکه برای نیم رساناهای III-V.....	۵
شکل ۳-۱: ساختار بلوری نیم رساناهای نیتروژندار (الف) NaCl و (ب) زینک بلند و (ج) ورتسایت.....	۶
شکل ۴-۱: شکل شماتیک دستگاه لایه نشانی به روش برآرایی باریکه مولکولی (MBE).....	۹
شکل ۵-۱: شکل شماتیک دستگاه سنتز به روش لایه نشانی شیمیایی در فاز بخار (CVD).....	۱۰
شکل ۶-۱: ساختار ورتسایتس نیتريد آلومینیوم.....	۱۴
شکل ۱-۲: چاه کوانتومی نوع I (In _{0.53} Ga _{0.47} As, In _{0.52} Ga _{0.48} As, GaSb/AlSb)	
چاه کوانتومی نوع II (InP, InAs, InSb, In _{0.52} Ga _{0.48} As), چاه کوانتومی نوع III (InAs/GaSb) [۸].	۱۸
شکل ۲-۲: طرح شماتیک از ماده حجمی، چاه پتانسیل، سیم کوانتومی و نقطه کوانتومی.....	۱۹
شکل ۳-۲: حالت‌های اشغال الکترون در فضای k برای یک سیم کوانتومی.....	۲۰
شکل ۴-۲: مقایسه میان چگالی حالت‌های حالت کپهای، دوبعدی و تک بعدی و صفر بعدی.....	۲۱
شکل ۵-۲: تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری از رشد نانوسیم های ژرمانیوم. (a) قطره ی طلا در ابعاد نانو متری در دمای ۵۰۰°C در حالت جامد. (b) شکل گیری آلیاژ در دمای ۸۰۰°C، در این مرحله طلا در حالت جامد است. (c) آلیاژ مایع ژرمانیوم/طلا. (d) جوانه زنی نانو بلور های ژرمانیوم. (f) رشد نانوسیم های ژرمانیوم.....	۲۳
شکل ۱-۳: مقایسه طیف CL ساختارهای حجمی AlN با درصد های متفاوتی از اکسیژن در دمای ۶K.....	۳۱
شکل ۲-۳: طیف فوتولومینسانس نانوذرات AlN در دمای اتاق.....	۳۴
شکل ۳-۳: طیف فوتولومینسانس نانوسیم های AlN در دمای اتاق.....	۳۴
شکل ۴-۳: طیف فوتولومینسانس نانوپودر های AlN در دمای اتاق.....	۳۵
شکل ۵-۳: طیف فوتولومینسانس حاصل از میکرو جعبه های شش وجهی متقارن.....	۳۶
شکل ۱-۴: طرح شماتیک برنامه دمایی کوره برای سنتز نمونه های سری A.....	۴۳
شکل ۲-۴: تصاویر SEM از نانوقفسه های نیتريد آلومینیوم سری A جمع آوری شده از دهانه ی لوله کوارتز.....	۴۳

- شکل ۴-۲: سه تصویر SEM از نانوسیمهای نیتريد آلومينيوم سری A. ۴۴.....
- شکل ۴-۴: طرح شماتيك برنامه دمایی كوره برای سنتز نمونه‌های B1. ۴۵.....
- شکل ۴-۵: تصویر SEM نانوسیمهای نیتريد آلومينيوم سری B1. ۴۵.....
- شکل ۴-۶: طرح شماتيك برنامه دمایی كوره برای سنتز نمونه‌های B2. ۴۶.....
- شکل ۴-۷: تصویر SEM نانوذرات نیتريد آلومينيوم سری B2. ۴۶.....
- شکل ۴-۹: تصویر SEM نانوسیمهای نیتريد آلومينيوم سری B3. ۴۷.....
- شکل ۴-۸: طرح شماتيك برنامه دمایی كوره برای سنتز نمونه‌های B3. ۴۷.....
- شکل ۴-۱۰: طرح شماتيك برنامه دمایی كوره برای سنتز نمونه‌های سری C. ۴۸.....
- شکل ۴-۱۱: تصویر SEM نانوسیمهای نیتريد آلومينيوم سری C1 (نمونه‌های سنتز شده با ۱ درصد منگنز و ۰/۳۵ گرم پودر A1). ۴۸.....
- شکل ۴-۱۲: تصویر SEM نانوسیمهای نیتريد آلومينيوم سری C2 (نمونه‌های سنتز شده با ۱ درصد منگنز و ۰/۴ گرم پودر A1). ۴۹.....
- شکل ۴-۱۳: تصویر SEM نانوسیمهای نیتريد آلومينيوم سری C3 (نمونه‌های سنتز شده با ۱ درصد منگنز و ۰/۵ گرم پودر A1). ۴۹.....
- شکل ۴-۱۴: تصویر SEM نانوذرات نیتريد آلومينيوم سری C4 (نمونه‌های سنتز شده با ۱ درصد منگنز و ۰/۵۵ گرم پودر A1). ۴۹.....
- شکل ۴-۱۵: تصویر SEM نانوذرات نیتريد آلومينيوم سری C5 (نمونه‌های سنتز شده با ۱ درصد منگنز و ۰/۶ گرم پودر A1). ۵۰.....
- شکل ۴-۱۶: تصاویر SEM نانوسیمهای نیتريد آلومينيوم سری D1 (نمونه‌های آلايش یافته با ۰/۵ درصد منگنز). ۵۱.....
- شکل ۴-۱۷: تصاویر SEM نانوسیمهای نیتريد آلومينيوم سری D2 که با ۲ درصد منگنز آلايش یافته‌اند. ۵۱.....
- شکل ۴-۱۸: تصاویر SEM نانوسیمهای نیتريد آلومينيوم سری E2 که با ۰/۷۵ درصد مس آلايش یافته‌اند. ۵۲.....
- شکل ۵-۱: طيف فوتولومينسانس نانوسیمهای AIN سری A در دمای اتاق. ۵۸.....
- شکل ۵-۲: مقایسه تغيير در شدت نور گسیلی نانوسیمهای AIN سری A بر اثر بازپخت تحت N2. ۵۸.....
- شکل ۵-۳: مقایسه تغيير در شدت نور گسیلی نانوسیمهای AIN سری A بر اثر بازپخت تحت Ar. ۵۹.....
- شکل ۴-۵: نمودار فوتولومينسانس نانوسیمهای نیتريد آلومينيوم سری C2. ۶۱.....

- شکل ۵-۵: مقایسه طیف فوتولومینسانس نانوسیمهای AIN سری C..... ۶۲
- شکل ۵-۶: نمودار فوتولومینسانس نانوسیمهای نیتريد آلومینیوم سری E4 (نمونه آلايش یافته با مس)..... ۶۳
- شکل ۵-۷: مقایسه تغییر در شدت نورگسیلی نانوسیمهای AIN سری E2 بر اثر بازپخت تحت N2..... ۶۴
- شکل ۵-۸: مقایسه تغییر در شدت نورگسیلی نانوسیمهای AIN سری E2 (آلايش یافته با ۰/۷۵ درصد مس) بر اثر بازپخت تحت تحت Ar..... ۶۵
- شکل ۵-۹: مقایسه طول موج سبز-آبی گسیلی از نمونه‌های سری E..... ۶۵
- شکل ۵-۱۰: تولید سه رنگ اصلی (آبی، سبز و قرمز) با شدت مناسب با استفاده از آلايش نانوسیمهای AIN..... ۶۶

فهرست جداول

صفحه	جدول
۷.....	جدول ۱-۱: برخی از خصوصیات ترکیبات نیتروژندار (InN و GaN، AlN) برای دو ساختار WZ و ZB.....
۴۲.....	جدول ۱-۴: شرایط سنتز نمونه‌های مختلف.....
۴۸.....	جدول ۲-۴: درصد ترکیب مواد اولیه در سنتز نانو ساختارهای AlN در سری C.....
۵۶.....	جدول ۱-۵: شرایط بازیخت نمونه‌های مختلف.....
۶۱.....	جدول ۲-۵: درصد ترکیب مواد اولیه در سنتز نانو سیم‌های AlN آرایش یافته در نمونه‌های سری C.....

فصل اول:

آشنایی با نیم رساناهای نیتروژندار

خواص و کاربردها

۱-۱ مقدمه

نیم رساناها گروهی از مواد هستند که رسانایی الکتریکی آنها بین فلزات و عایقها قرار دارد. ویژگی مهم این مواد این است که رسانایی آنها با تغییر دما و برانگیختگی نوری و میزان ناخالصی به میزان قابل ملاحظه ای تغییر می کند. از سال ۱۹۷۰ نیم رساناهای نیتروژندار به عنوان مواد نیم رسانای بسیار مفید در ساخت قطعات، به ویژه دیودهای نور گسیلⁱ معرفی شده اند. تهیه InN, AlN, GaN و ترکیبات آلیاژی سه تایی و چهارتایی از این مواد باعث پیشرفت‌های زیادی در علم حالت جامد شده است. الکترونکاتیوی بالا و شعاع کم نیتروژن در مقایسه با دیگر عناصر گروه پنجم، هم‌چنین پیوند قوی با عناصر گروه سوم باعث ایجاد خواص جالبی در ترکیب نیتروژن با عناصر گروه سوم شده است. از ویژگی‌های بارز نیم رساناهای نیتروژندار می توان به گاف نواری پهن و مستقیم آنها اشاره نمود که از 0.7 eV (InN) تا 6.2 eV (AlN) متغیر است و همین گاف نواری، این مواد را به موادی مناسب برای کاربردهای اپتیکی تبدیل نموده است. در مقایسه با ترکیبات بر پایه Ge, Si و GaAs این مواد دارای دمای ذوب بالاتر، رسانایی گرمایی بهتر، میدان شکست بهمنیⁱⁱ بزرگتر و ثابت پیزو الکتریکⁱⁱⁱ بالاتر می باشند، که این تفاوت‌ها آنها را به موادی پرکاربرد برای مصارف فرکانس بالا و توان بالای قطعات الکتریکی و اپتیکی تبدیل نموده است [۵ و ۲].

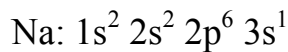
۲-۱ ساختار نواری نیم رساناها

یک بلور به‌طور ذاتی دارای تعداد زیادی از الکترونها در واحد حجم است. برخی از این الکترونها پوسته‌های داخلی اتم را اشغال می‌کنند و وابسته به هسته هستند که این الکترونها در مقابل اثر اتم‌های همسایه بوسیله‌ی الکترونهای پوسته‌ی خارجی استتار می‌شوند. ترازهای انرژی در این حالت مشابه ترازهای اتم‌های تکی هستند. ولی خواص الکترونهای خارجی در اتم‌های منزوی متفاوت است. تابع موج الکترونها در تمامی شبکه‌ی بلور گسترده شده است. به علاوه طیف انرژی آنها از یک مجموعه ترازهای انرژی خیلی نزدیک به هم که به آن نوار انرژی می‌گویند، تشکیل شده است. این نوارهای انرژی به وسیله‌ی گاف‌های انرژی از یکدیگر جدا می‌شوند. به‌طور ساده ابتدا ترازهای یک تک اتم را در نظر می‌گیریم؛ مثل اتم سدیم که تراز آخر آن نیمه‌پر است.

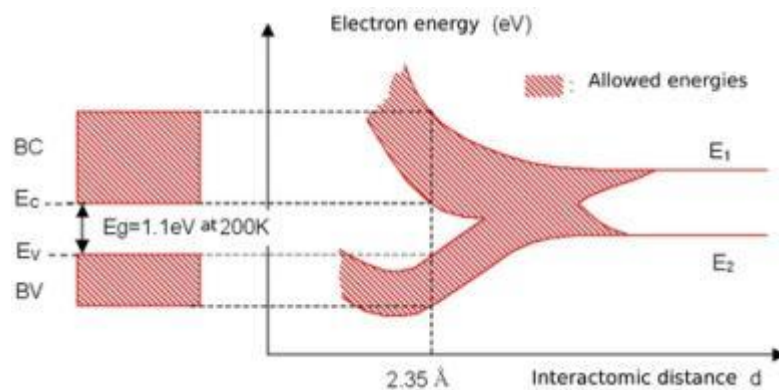
ⁱ LEDs

ⁱⁱ Avalanche breakdown fields

ⁱⁱⁱ Piezoelectric constants



وقتی دو اتم سدیم را به هم نزدیک می‌کنیم ترازهای انرژی این سیستم دوتائی هرکدام دارای تبهگنی دوگانه‌اند. یعنی هر الکترون در یک اتم دارای همتای خود با ساختار انرژی دقیقاً یکسان در اتم دیگر است. وقتی اتم‌ها به هم نزدیک می‌شوند، این تبهگنی در نتیجهی برهم‌کنش بین دو اتم از بین می‌رود و هر تراز انرژی به دو تراز تبدیل می‌شود (شکل ۱-۱)، هرچه اتم‌ها به یکدیگر نزدیک‌تر شوند، پتانسیل برهم‌کنش قوی‌تر و در نتیجه شکافتگی ترازها در هر تراز دوتائی بزرگتر خواهد بود و چون ترازهای داخلی به هسته اتم وابسته‌تر هستند، شکافتگی ترازهایشان نسبت به شکافتگی ترازهای خارجی کمتر است. وقتی که تعداد اتم‌ها به N برسد هر تراز انرژی اتمی به N زیر تراز جداگانه تقسیم می‌شود و در یک سانتی‌متر مکعب از یک بلور عدد N تقریباً به 10^{23} می‌رسد. بنابراین فاصله‌ی انرژی بین زیرترازهای ایجاد شده خیلی کوچک بوده و در حدود 10^{-23} eV تا 10^{-22} eV خواهد بود. مجموعه‌ی این زیر ترازها را می‌توان به صورت یک نوار انرژی در نظر گرفت. مناطق انرژی بین نوارها، گاف‌های انرژی هستند که هیچ تراز انرژی مجازی در آنها وجود ندارد [۱].



شکل ۱-۱: شکافتگی ترازهای انرژی E_1 و E_2 بر اثر برهم‌کنش بین‌اتمی.

۳-۱ نیم رساناهای نیتروژندار

همانگونه که قبلاً اشاره شد، ترکیب عناصر گروه سوم با نیتروژن، گروه ویژه‌ای از نیم رساناها را تحت عنوان نیم رساناهای نیتروژندار (III- نیتريدها) به وجود آورده است. تفاوت اصلی میان III- نیتريدها و سایر ترکیبات III-V مربوط به دو خاصیت کلی اتم نیتروژن می‌باشد. این دو ویژگی، اندازه اتم N و ماهیت پیوند شیمیایی میان این اتم و اتم‌های گروه سوم، می‌باشد. شعاع کوالانسی

کوچک نیتروژن ($\sim 0.7 A^\circ$) در مقایسه با $1/1 A^\circ$ برای P و $1/1 A^\circ$ برای As و $1/36 A^\circ$ برای Sb) باعث کاهش چشمگیری در ثابت شبکه نیم رساناهای نیتروژندار نسبت به سایر ترکیبات III-V (شکل ۱-۲) و در نتیجه، همانگونه که پروسکیⁱ و گرامچگوریⁱⁱ در سال ۱۹۹۴ بیان داشتند، بوجود آمدن انرژی پیوندی بالا ($2/28 eV$ برای AlN، $2/2 eV$ برای GaN و $1/93 eV$ برای InN) برای این ترکیبات شده است [۲]. این افزایش انرژی پیوندی باعث بالا رفتن دمای ذوب نیم رساناهای نیتروژندار می شود. گاف انرژی در نیم رساناهای نیتروژندار مستقیم است، بنابراین گسیل نوار به نوار بدون هیچ گونه فرآیند فونونی صورت می گیرد. گاف نواری آنها بوسیله آلیاژ کردن این مواد با یکدیگر تا $5/5 eV$ تغییر می کند. در آلیاژ سه تایی $Al_xGa_{1-x}N$ گاف نواری با تغییر میزان AlN از ۰ تا ۱۰۰ درصد بین $3/4$ تا $6/2 eV$ تغییر می کند. گاف نواری $In_xGa_{1-x}N$ با تغییر میزان InN از ۰ تا ۱۰۰ درصد بین 0.7 تا $3/4 eV$ تغییر می کند. گاف نواری نیم رساناهای نیتروژندار توسط قانون وگاردⁱⁱⁱ به صورت زیر محاسبه می شود:

$$E_g(AN)(1-X) + E_g(BN)X = E_g(ABN) \quad (1-1)$$

که در آن $E_g(AN)$ ، $E_g(BN)$ و $E_g(ABN)$ به ترتیب نشان دهنده ی گاف نواری دو جزی سازنده آلیاژ و گاف نواری آلیاژ حاصل است. گاف انرژی نیم رساناها به دما نیز وابسته است، که این وابستگی دمایی از رابطه وارشنی^{iv} به صورت زیر محاسبه می شود:

$$E_g(T) = E_0 - \frac{\alpha T^2}{(T+\beta)} \quad (2-1)$$

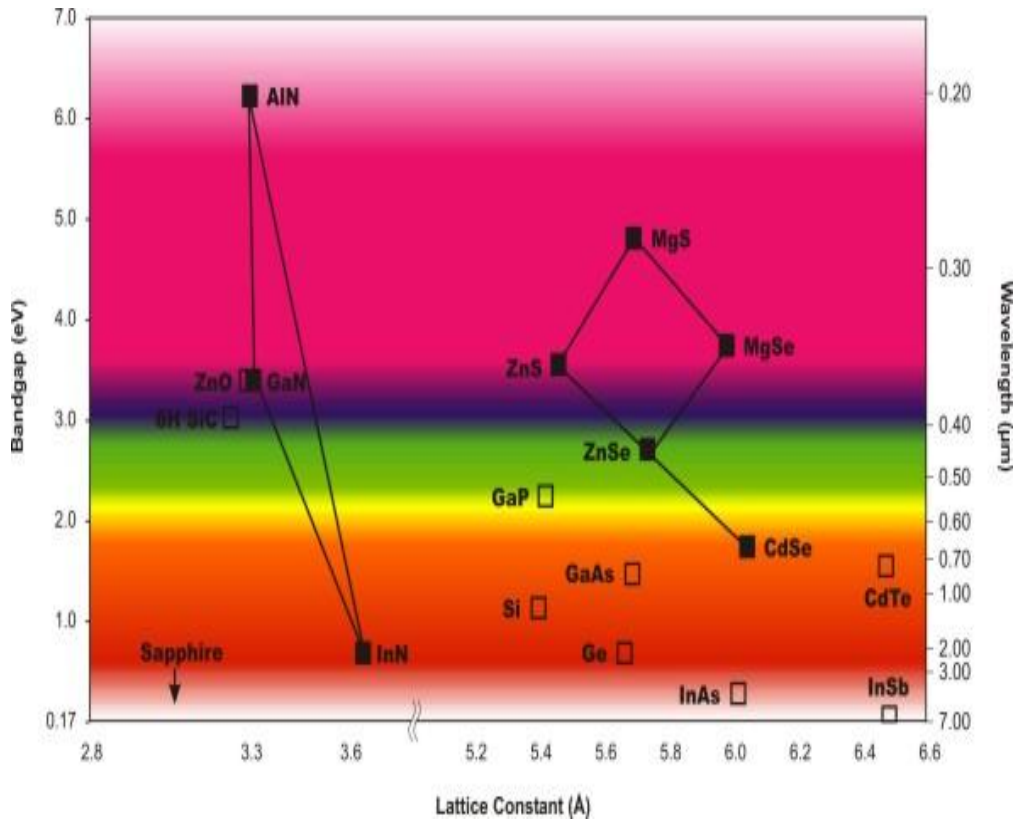
که در این رابطه، T دما برحسب کلوین، E_0 انرژی در دمای صفر مطلق و α و β ثابت ها هستند.

ⁱPorowski

ⁱⁱGrzegory

ⁱⁱⁱVegard s law

^{iv}Varshni



شکل ۱-۲: نمودار گاف انرژی بر حسب پارامتر شبکه برای نیم رساناهای III-V

کاربردهای اپتوالکتریکی نیم رساناهای نیتروژندار یکی از مهمترین کاربردهای آنها می باشد. گسیل اپتیکی حاصل از GaN و AlN بدلیل گاف نواری پهن و مستقیم آنها، در ناحیه UV طیف الکترومغناطیسی قرار می گیرد. به دلیل شرایط دشوار رشد InN محاسبه گاف نواری آن مشکل است. اما از سال ۲۰۰۲ به بعد گروه های متفاوتی مقادیر مختلفی از $0.7 - 1/eV$ را گزارش نموده اند [۲].

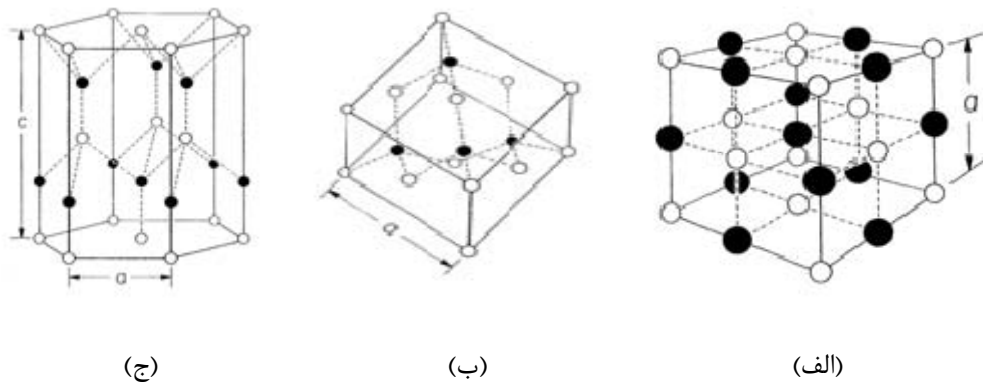
۴-۱ ساختار بلوری نیم رساناهای نیتروژندار

ترکیبات نیتروژندار گروه سوم دارای سه ساختار کلی $NaCl^i$ ، ورتسایت (Wz) i و زینک بلند ZB^iii می باشد (شکل ۱-۳). اما پایدارترین ساختار ترمودینامیکی AlN، GaN و InN ساختار ورتسایتس می باشد. InN و GaN، AlN، وقتی که در فشارهای بالا قرار بگیرند بصورت NaCl متبلور می شوند.

ⁱ Rocksalt

ⁱⁱ Wurtzite

ⁱⁱⁱ Zinblend



شکل ۱-۳: ساختار بلوری نیم رساناهای نیتروژندار (الف) NaCl و (ب) زینک بلند و (ج) ورتسایت

برخی از خصوصیات ترکیبات نیتروژندار در جدول (۱-۱) برای دو ساختار Wz و ZB نشان داده شده است. ساختار ورتسایت دارای یک سلول واحد شش گوشⁱ با دو ثابت شبکه است و شامل شش اتم از هر نوع در سلول واحد می باشد. این ساختار از دو شبکه hcpⁱⁱ که هر کدام به اندازه $(\sqrt{3}c/8)$ در هم فرورفته اند ساخته شده است. ساختار ZB همانند ساختار الماسی از دو شبکه fccⁱⁱⁱ که به اندازه $1/4$ قطر اصلی در هم فرورفته اند، تشکیل شده است. در ساختار ZB هر شبکه fcc از یک نوع اتم تشکیل شده است بطوریکه به نظر می آید هر اتم در مرکز یک چهاروجهی قرار گرفته است. بسته به اینکه چه زیر لایه ای برای رشد ترکیبات نیتروژندار به کار گرفته شود بلور آنها ساختار Wz و یا ساختار ZB به خود می گیرد. ساختار Wz در صورت رشد روی SiC و یا Al_2O_3 بدست می آید، در صورتیکه اگر رشد بر روی GaAs باشد ساختار ZB بدست می آید. ساختارهای Wz و ZB تا حدودی مثل هم هستند. در هر دو ساختار اتم های گروه III با چهار اتم N احاطه می شود، یا برعکس هر اتم N با چهار اتم از گروه III احاطه می شود. تفاوت بین دو ساختار در نحوه درهم فرورفتگی صفحات اتمی است که برای ساختار Wz صفحه (0001) ، ABAB...، در جهت $\langle 0001 \rangle$ است و برای ساختار ZB صفحه (111) ، ABCABC...، در جهت $\langle 111 \rangle$ است [۳-۵].

ⁱ hexagonal
ⁱⁱ Hexagonal close-packed
ⁱⁱⁱ Face center cubic