

## دراسة تأثير درجات الحرارة على فجوة الطاقة وحساب الطاقات الفعالة للانتقالات الإلكترونية والأطوال الموجية المرافقة لها لسبيكة $Ga_{0.35}In_{0.65}As/InP$

حسن طريخم بدح ال حمادي علي ناظم صبار ال يونس

قسم الفيزياء- كلية العلوم- جامعة المثنى

تاريخ الاستلام/ 2016-4-21 تاريخ القبول/ 2016-9-1 تاريخ النشر/ 2016-10-20

### الخلاصة (Abstract)

في هذا البحث تم دراسة التأثيرات الحرارية على فجوة الطاقة وتأثير عرض بئر الجهد على الخواص الكمية لأشباه الموصلات ذات التركيب الغير متجانس والتي تمتلك عرض بئر جهد نانوي للسبيكة  $Ga_{0.35}In_{0.65}As/InP$ . كما تم تعيين طاقات الحالات الكمية في ابار الجهد في حزم التوصيل وحزم التكافؤ للسبيكة قيد الدراسة، كذلك تم حساب الطاقات الفعالة للانتقال الإلكترونيات والأطوال الموجية المرافقة لها داخل تلك الأبار. لوحظ ان طاقة الفجوة تزداد كلما قلت درجة الحرارة الى درجات حرارية منخفضة جدا، كما لوحظ ظهور الحالات الكمية كلما قل عرض بئر الجهد الى البعد النانوي. كما اظهرت النتائج ان هناك تحسن بالخواص الفيزيائية للسبيكة.

### 1. المقدمة (Introduction)

في كثير من المجالات كالاتصالات والإلكترونيات والليزرات. ان دراسة الخواص الفيزيائية الأساسية لسبيكة  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP$  بينت ان فجوة الطاقة للمركب  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$  هي (0.75eV) وللمركب  $InP$  هي (1.34eV) اي لمدى من الأطوال موجية (925-1653nm) [1]. كما تمت دراسة التركيب البلوري للمركب  $InGaAs$  والمرسبة على  $InP$  بواسطة تقنية STM (المجهر النفقي الماسح) [2,3]. كما تم استخدام هذه السبائك في تصميم كثير من الاجهزة كدايود الكاشف (single-photon detection) [4].

الكثير من الدراسات والبحوث العملية والنظرية اجريت على مركبات وسبائك اشباه الموصلات في العقود الاخيرة لما لها من اهمية علمية ولتطبيقاتها الكثيرة في الاجهزة الحديثة المختلفة.

$In_{1-x}Ga_xAs/InP$  هي مادة شبه موصله تتكون من عناصر تقع ضمن المجموعة الثالثة (III) والخامسة (V) من الجدول الدوري. بلورات اشباه الموصلات التي لها ابار جهد كمية هي مثال على البلورات الغير متجانسة hetero-structure. ولها تطبيقات

### 2. الجانب النظري (Theoretical part)

أشباه الموصلات في درجة حرارة الغرفة [5,6]. معظم مركبات اشباه الموصلات تمتلك تركيب بلوري Zinc blend، وهي شبكية بلورية متمركزة الاوجة. ثوابت الشبيكة للمركبات المكونة للسبيكة يجب ان تكون متطابقة او قريبة من بعضها والا سوف تحدث عيوب بلورية، حيث الجدول (1) يعطينا التركيب البلوري وثوابت الشبيكة للمركبات المكونة للسبيكة [7,8].

يتم تحضير هذه التراكيب بعدة تقنيات اهمها (MBE) molecular beam epitaxy و (MOCVD) metal organic chemical vapor deposition. سمك الطبقات المحضرة بهذه التقنيات يمكن التحكم بها بدقة عالية جدا (دقة ذرية) هذا يجعل من السهل تحقيق سمك طبقة رقيقة لازمة لحصول الحصر الكمي من الإلكترونات في

الجدول (1) التركيب البلوري وثوابت الشبيكة للمركبات المكونة للسبيكة  $Ga_{0.35}In_{0.65}As/InP$

الخاصية	GaAs	InP	InAs	$Ga_{0.35}In_{0.65}As$
الشبيكة البلورية	Zinc blende	Zinc blende	Zinc blende	Zinc blende
ثابت الشبيكة	5.65Å	5.88Å	6.1Å	5.88Å

تحسب فجوة الطاقة  $E_g$  للمركب  $Ga_{0.35}In_{0.65}As$  عند درجة حرارة الغرفة من المعادلة [8,9]:

$$E_g(eV) = 0.3 + 0.63x + 42x^2, \quad (1)$$

حيث  $x$  هي نسبة الكاليوم في المركب. ولدرجات حرارة مختلفة تكون فجوة الطاقة دالة ل  $x$  و  $T$  وكما في المعادلة [8, 9]:

$$E_g(x,T) = 0.42 + 0.625 - [(5.8/T + 300) - (4.19/T + 271)] * 10^{-4} T^2 x - (4.19 * 10^{-4} / T + 271) + 0.475x^2. \quad (2)$$

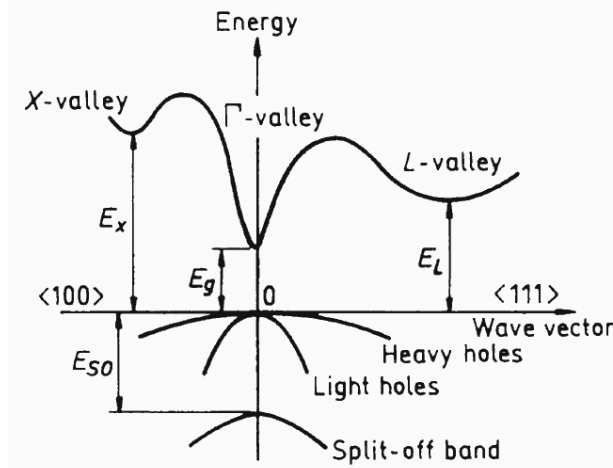
اما تأثيرات درجات الحرارة على فجوة الطاقة للمركب InP فتعطى باستخدام معادلة فيرشن [10]:

$$E_g(T) = E_g(0) - \alpha T^2 / T + \beta \quad (eV). \quad (3)$$

حيث  $E_g(0)$  هي فجوة الطاقة عند درجة الصفر المطلق،  $T$  هي درجة الحرارة المطلقة.  $\beta$  و  $\alpha$  ثوابت تمتلك القيم  $\beta = 327 \text{ K}$  و  $\alpha = 4.5 * 10^{-4} \text{ eV/k}$  [11].

$E_{SO}$  و  $E_X$ ،  $E_L$  هنا  $Ga_{0.35}In_{0.65}As$  قيد الدراسة. هنا  $E_{SO}$  و  $E_X$ ،  $E_L$  طاقات يمكن تحديد قيمها باستخدام معادلات تعتمد على قيمة  $x$  [12].

الشكل (2) يبين حزم التوصيل التي تحتوي على حزمة واحدة وحزم التكافؤ التي تحتوي على ثلاث حزم وفجوة الطاقة المباشرة للمركب



الشكل (1) يمثل تركيب حزم الطاقة في المركبات ذات فجوة الطاقة المباشرة [12]

الموصل ثلاثية البعد (structure quantum dot) الشكل (2) يمثل بئر جهد كمي مربع الشكل [13]. يبين الحالات الكمية  $E_c$  في حزم التوصيل و  $E_{hh}$  و  $E_{lh}$  في حزم التكافؤ والتي حددت قيمها من حل معادلة شرودنكر داخل بئر جهد كمي. كما يبين عرض بئر الجهد  $L_z$  وارتفاع حاجز الجهد (band offset)  $\Delta E_V$  و  $\Delta E_C$ . من حل معادلة شرودنكر داخل بئر جهد كمي محدد نحصل على [7,8]:

$$\tan\left(\frac{KLz}{2}\right) = \frac{m_w^* K}{m_b^* k}. \quad (4)$$

حيث قيم  $k$  و  $K$  تحدد من المعادلتين 5 و 6 داخل منطقتي QW و Barrier على التوالي. كما ان  $m_b^*$  و  $m_w^*$  تمثل قيم الطاقات الفعالة في QW و Barrier على التوالي.

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_w^*}. \quad (5)$$

$$V_0 - E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_b^*} \tag{6}$$

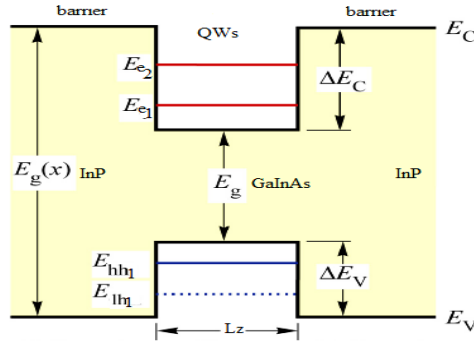
وبتعويض  $x=kL_z/2$  في المعادلة (4) نحصل على:

$$E = \frac{2\hbar^2 x^2}{m_w^* L_z^2} \tag{7}$$

الطاقات الفعالة اللازمة لانتقال الالكترتون من حزمة التكافؤ الى حزمة التوصيل تحسب من خلال المعادلات [7]:

$$E_{\text{eff./hh}}(\text{eV}) = E_g + E_e + E_{\text{hh}} \tag{8}$$

$$E_{\text{eff./lh}}(\text{eV}) = E_g + E_e + E_{\text{lh}} \tag{9}$$



الشكل (2) الحالات الكمية في ابار الجهد الكمية المربعة الشكل

الكتل الفعالة (the effective mass) للمركبات المكونة للشبيكة تعتمد على قيمة  $x$  وقيمتها للمركب  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  عند 300K هي مبينة بالمعادلات ادناه [12]:

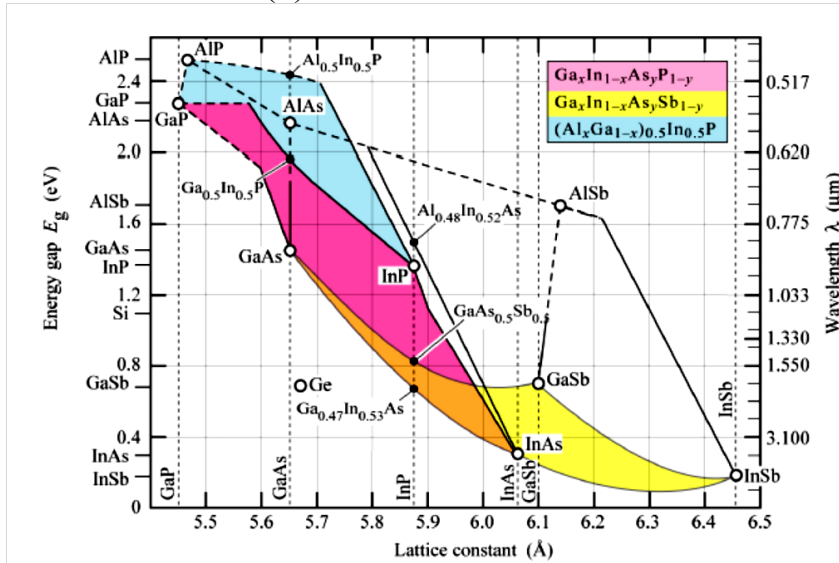
$$m_e^* = m_\Gamma \cong 0.023 - 0.037x + 0.00x^2 m_0 \tag{10}$$

$$m_{\text{hh}}^* \cong (0.41 - 0.1x)m_0 \tag{11}$$

$$m_{\text{lh}}^* \cong (0.026 - 0.056x)m_0 \tag{12}$$

بعضها ولكنها تختلف بفجوة الطاقة كما في الجدول (1) ومخطط طاقة الفجوة مع ثابت الشبيكة كما في الشكل (3) يبين كيفية تكوين تلك السبائك.

اشباه الموصلات ذات التراكيب الغير متجانس هي سبائك تجمع من مركبات لها نفس التراكيب البلورية ونفس ثابت الشبيكة او قريبة من



الشكل (3) مخطط فجوة الطاقة مع ثابت الشبيكة للعديد من مركبات اشباه الموصلات وسبائكها عند درجة حرارة الغرفة

تكونت  $\Delta E_C$  و  $\Delta E_V$  وتم حسابهما باستخدام موديل نموذج تقارب الإلكترونات (The electron affinity model) بحيث ان النسبة  $\Delta E_C/\Delta E_V$  هي 36:64 للسبيكة قيد الدراسة [8,14].

السبيكة عند درجتي حرارة الغرفة و عند الصفر المطلق. كما تم حساب ارتفاع حاجز الجهد (band offset) وكانت النتائج هي  $\Delta E_C = 0.263$  eV اما  $\Delta E_V = 0.467$  eV .

عند جمع مادتين مختلفتين في فجوة الطاقة تتشكل ثلاث انواع من السبائك من حيث شكل التقاء مستويات الطاقة في المادتين، السبيكة المستخدمة في هذا البحث هي من النوع الاول (I type) بحيث

### 3. الحسابات و النتائج (Calculations and results)

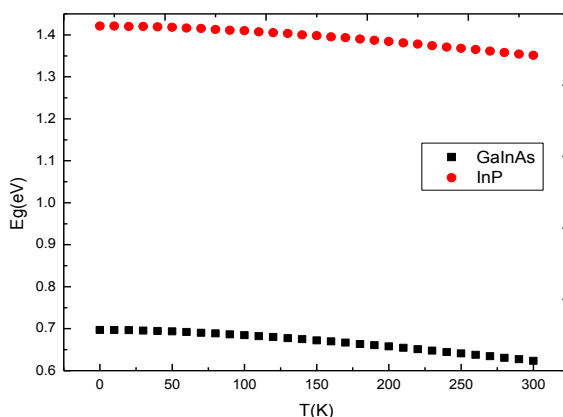
تم تحديد قيمة فجوة الطاقة عند درجات حرارة مختلفة. الجدول (2) يبين قيمتها لمركبات

الجدول(2) فجوة الطاقة للمركبات المكونة للسبيكة عند درجتي حرارة الغرفة والصفر المطلق

الخاصية	InP	InAs	Ga <sub>0.35</sub> In <sub>0.65</sub> As
$E_g$ (eV) 300K	1.351	0.354	0.62
$E_g$ (eV) 0K	1.421	0.415	0.7

درجة الحرارة تؤدي الى انخفاض في قيمة فجوة الطاقة. بالإضافة الى ذلك فان حدود حزم الطاقة تتزاح بسبب زيادة حركة الذرات وبالتالي يؤدي الى توسع مستويات الطاقة. وكذلك فان التفاعلات الالكترونية داخل الشبيكة البلورية يعتمد بشدة على درجات الحرارة.

الشكل (4) يبين تأثير زيادة درجات الحرارة على فجوة الطاقة لاشباه الموصلات الغير متجانسة بالاعتماد على المعادلتين (2 و 3). فعند زيادة درجة حرارة اشباه الموصلات يؤدي الى زيادة تمدد الشبيكية وتزداد اهتزازات ذرات المادة حول نقاط توازن الشبيكية البلورية. نلاحظ ان زيادة



الشكل(4) تأثير زيادة درجات الحرارة على فجوة الطاقة لاشباه الموصلات الغير متجانسة

الالكترونية وكثافة الحالات والتوصيلية الضوئية والتوصيلية الكهربائية والامتصاصية. الجدول (3) يبين الكتل الفعالة لمركبات السبيكة، استخدمت معادلات 12,11,10 لتحديدتها.

نلاحظ من الجدول (4) تأثير تقليل عرض بئر الجهد الكمي على الحالات الكمية داخل البئر حيث كلما قل عرض بئر الجهد تزداد قيمة طاقة الحالة الكمية، وهذا يعني ان الابعاد النانوية للمواد تغير من خواص المواد مثل خاصية الانتقالات

الجدول (3) بين الكتل الفعالة لمركبات السبيكة قيد الدراسة

المركب	$m_{e1}^*$	$m_{hh1}^*$	$m_{jh1}^*$
Ga <sub>0.35</sub> In <sub>0.65</sub> As	0.004m <sub>o</sub>	0.375 m <sub>o</sub>	0.006 m <sub>o</sub>
InP	0.08 m <sub>o</sub>	0.60 m <sub>o</sub>	0.082 m <sub>o</sub>

باستخدام المعادلة (7) تم تحديد قيم طاقات الحالات الكمية في بئر الجهد الكمي داخل حزم التوصيل وحزم التكافؤ للسبيكة ولقيم مختلفة لعرض البئر  $L_z$ .

الجدول (4) طاقات الحالات الكمية بوحدات الاليكترون فولت ولقيم مختلفة ل  $L_z$  وبوحدات النانومتر

$L_z$ (nm)	$E_{e1}$ (eV)	$E_{hh1}$ (eV)	$E_{jh1}$ (eV)
5	0.0051	0.0163	0.0112
10	0.0029	0.0050	0.0056
20	0.0016	0.0014	0.0026

لاننتقال الاليكترون من حزمة التكافؤ الى الحزمة التوصيل والتي تحقق شرط الانتقال وكذلك الاطوال الموجية المرافقة لها مبينة في الجدول (5).

من خلال النتائج في الجدول (4) ظهرت ان هناك سبع حالات كمية في حزمة التوصيل وستة حالات كمية في حزمة التكافؤ عندما يكون  $L_z=5nm$ . لذلك فان قيم الطاقات الفعالة والازمة

الجدول (5) الطاقات الفعالة والاطوال الموجية المرافقة لها عندما يكون  $L_z=5nm$ 

عدد الكم الرئيسي N	$E_{effect}(E_{hh} \rightarrow E_e)$ (eV)	$\lambda = \frac{hc}{E_g}$ (nm)	$E_{effect}(E_{hh} \rightarrow E_e)$ (eV)	$\lambda = \frac{hc}{E_g}$ (nm)
1	0.641	1934	0.636	1949
2	0.705	1758	0.685	1810
3	0.812	1527	0.766	1618
4	0.962	1288	0.880	1409
5	1.155	1073	1.027	1207
6	-	-	1.206	1027

والاطوال الموجية المرافقة لها وكما في الجدول (6). بينما الجدول (7) يبين الحالات عندما  $L_z = 20 nm$ .

اما عند يكون  $L_z=10nm$  وجدنا من خلال الحسابات ان هناك تسع حالات كمية في كل من حزمة، وعلية فان هناك تسع طاقات انتقال الكترونية والتي تحقق شرط الانتقال  $\Delta n=0$

الجدول (6) الطاقات الفعالة والاطوال الموجية المرافقة لها عندما يكون  $L_z=10 nm$ 

عدد الكم الرئيسي N	$E_{effect}(E_{hh} \rightarrow E_e)$ (eV)	$\lambda = \frac{hc}{E_g}$ (nm)	$E_{effect}(E_{hh} \rightarrow E_e)$ (eV)	$\lambda = \frac{hc}{E_g}$ (nm)
1	0.628	1974	0.6285	1972
2	0.651	1904	0.654	1896
3	0.691	1794	0.696	1781
4	0.746	1662	0.756	1640
5	0.817	1517	0.832	1490
6	0.904	1371	0.926	1339
7	1.007	1231	1.036	1196
8	1.125	1102	1.164	1065
9	1.26	984	1.308	948

الجدول (7) الطاقات الفعالة والاطوال الموجية المرافقة لها عندما يكون  $L_z = 20 \text{ nm}$ 

عدد الكم الرئيسي N	$E_{\text{effect}}(E_{\text{hh}} \rightarrow E_e)$ (eV)	$\lambda = \frac{hc}{E_g}$ (nm)	$E_{\text{effect}}(E_{\text{hh}} \rightarrow E_e)$ (eV)	$\lambda = \frac{hc}{E_g}$ (nm)
1	0.623	1990	0.624	1986
2	0.632	1962	0.636	1974
3	0.647	1916	0.657	1885
4	0.668	1856	0.687	1804
5	0.695	1784	0.725	1710
6	0.728	1703	0.771	1607
7	0.767	1616	0.825	1501
8	0.812	1527	0.888	1395
9	0.863	1436	0.960	1291
10	0.92	1347	1.04	1192
11	0.983	1261	1.128	1099
12	1.052	1178	1.224	1012

يظهر بنقصان عرض بئر الجهد الى ابعاد نانوية نلاحظ عند البعد 10 nm و 20 nm ان هناك فرة من حالات الانتقال الالكترونية تشمل كل الاطوال الموجية والتي تعمل ضمنها هذه السبيكة والتي تكون مفيدة جدا لدراسة الخواص الفيزيائية لها كالاتصافية والتوصيل الالكتروني وكثافة الحالات واحتمالية الاشغال وتراكيز الحاملات.

J. Appl. Phys.(2001) tunneling microscopy”

[4] Fabio Acerb, et al, “Design Criteria for InGaAs/InP Single-Photon Avalanche Diode” IEEE Photonics Journal(2013)

[5] E. Herbert Li, “Optical Properties of an InGaAs-InP Interdiffused Quantum Well” IEEE Journal Of Quantum Electronics, 1998.

[6] Jasprit Singh, “Electronic and Optoelectronic Propertie Semiconductor Structures” University of Michigan, Ann Arbor,2003

[7] MARK FOX, “Optical Properties of Solids, Oxford University Press” (2001).

#### 4. الاستنتاجات (Conclusions)

ان السبيكة التي تم اجراء الحسابات عليها هي  $\text{Ga}_{0.35}\text{In}_{0.65}\text{As}/\text{InP}$  حيث  $x=0.35$  وبالتالي تم تغير مدى الاطوال الموجية لمدى اوسع ( $917\text{nm}-2000$ ) وذلك لتغير قيمة طاقة فجوة المركب  $\text{Ga}_{0.35}\text{In}_{0.65}\text{As}$  الى (0.62 eV) مما يعطينا مدى اوسع لدراسة الخواص الفيزيائية للعينة. ان زيادة درجة الحرارة تؤدي الى انخفاض في قيمة فجوة الطاقة للسبيكة. كما ان التأثير الكمي للمادة

#### 5. المصـادر (References)

[1] Tiwari and Frank, “Empirical fit to band discontinuities and barrier heights in III-V alloy systems” Journal of Applied physics letters, (1992).

[2] Ichirou Yamakawa et al, “Cross-Sectional Scanning Tunneling Microscopy Study of Interfacial Roughness in an InGaAs/InP Multiple Quantum Well Structure Grown by Metalorganic Vapor Phase Epitaxy” 2003 The Japan Society of Applied Physics.

[3] Huajie Chen and R. M. Feenstra “InGaAs/InP quantum well intermixing studied by cross-sectional scanning

[11] G.L.Tuin, Final master Thesis, February 2010.

[12] Goldberg Yu.A. and N.M. Schmidt, "Handbook Series on Semiconductor Parameters". World Scientific, London, 1999.

[13] Charles P. Poole, Jr. and Frank J. Owens, "Introduction To Nanotechnology" 2003.

[14] B.R.Nag, "Physics of Quantum Well Devices" Springer Science, 2006.

[8] E. F. Schubert, "physical foundations of solid-state devices" Rensselaer Polytechnic Institute, Troy NY, USA, 2009.

[9] S. Paul, J.B. Roy, P.K. Basu, J. Appl, "NSM Archive - Physical Properties of Semiconductors" Phys. (1991).

[10] Y. P. Varshni, "Temperature dependence of the energy gap in semiconductors" Physica 34 149-154 (1967).

### **Study the Effect of Temperature on Energy Gap and Calculation Energies of the Effective Electronic Transitions and Wave lengths associated with those active energies of Alloy $Ga_{0.35}In_{0.65}As/InP$**

**Hassan Traikim Badh AL Hamade – Ali Nadhim Sabbar AL Yunsi  
Department Of Physics, College Of Science, Al-Muthanna University**

#### **Abstract**

The thermal effects on the energy gap and the effect of width of potential well on the quantity properties of hetero- structure nano semiconductors ( $Ga_{0.35}In_{0.65}As/InP$ ) have been studied.

The energy of quantum wells in conductive and valance bands of alloy has been calculated. Then have been calculated effective energies of transition electronics and associated wavelengths within those well. That was noted the energy gap increases due to reducing temperature to very low degrees also noted the emergence of quantum wells whenever reducing width of potential well to nano dimensions. The results showed that there are improvements in the physical properties of the alloy.