





دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک
گرایش حالت جامد

بررسی خواص ترابری الکترونها در ساختار نیم رسانای $InGaN$ در حد میدان های الکتریکی ضعیف

اساتید راهنما:

۱- جناب آقای دکتر هادی عربشاهی

۲- جناب آقای دکتر محمد ابراهیم قاضی

دانشجو:

علی سماعی

شهریور ۸۳

شهریور ۸۳
۱۳۸۳/۱۰/۲۷

تقدیم به :

فرزند محمد مهدی

۹

خورشید زندگیم همسرم که صبر از او صبوری آموخت

به نام یگانه معبود گیتی

سپاس و ستایش فدای را که توفیق تمصیل بعد از چندین سال که وقفه در تمصیلاتم ایجاد شده بود دوباره به من عطا فرمود. برفود لازم می‌دانم از زحمات کلیه اساتید محترم گروه فیزیک که در مراحل مختلف تمصیل افتخار شاگردی ایشان را داشته‌ام تشکر و قدردانی کنم. به‌فصوص از زحمات و راهنمایی‌های بی‌دریغ استاد ارجمندم جناب آقای دکتر هادی عربشاهی که در انجام مراحل مختلف این طرح مرا یاری نمودند سپاسگذارم.

همچنین مراتب سپاس و تشکر خود را از جناب آقای دکتر محمد ابراهیم قاضی به خاطر راهنمایی‌های ایشان به عنوان استاد راهنمای دوم طرح ابراز می‌دارم. از جناب آقای دکتر قربانی و جناب آقای دکتر عشقی که زحمت مطالعه پایان‌نامه و حضور در جلسه دفاع را متحمل شدند تشکر و سپاسگزاری می‌کنم. همچنین از پدر و مادر بزرگوارم که در طول تمصیلات دعاهایشان همواره بدرقه راهم بوده قلباً قدردانی می‌کنم، و از جناب آقای نادر سماعی برادر گرامیم که در امر آموزش قسمت‌های مختلف کامپیوتر مرا یاری نمودند صمیمانه تشکر می‌کنم.

علی سماعی

چکیده

خواص ترابری الکترون ها در ترکیبات دو و سه تایی مواد نیمرسانا در حد میدان های الکتریکی پایین اولین بار توسط رود (Rode) با حل معادله بولتزمن به روش برگشت پذیری انجام پذیرفت . هر چند بعدها روش های دیگری نظیر روش مونتوکارلو (Monte Carlo) نیز مطرح گردید . در مطالعه خواص ترابری الکترون در حد میدان های الکتریکی پایین عموماً تحرک پذیری الکترون بر حسب تابعی از دما و چگالی اتم های ناخالصی تعیین می شود . چنانچه می دانیم تحرک پذیری مهمترین عامل الکتریکی یک ماده نیمرسانا است و با تعیین آن می توان به خواص الکتریکی ماده و کاربردهای آن در طراحی و ساخت قطعات نیمرسانا پی برد . موضوع این پروژه نیز تعیین پارامتر الکتریکی تحرک پذیری (Γ) الکترون ها در ماده نیمرسانای $\text{In}_{0.48}\text{Ga}_{0.52}\text{N}$ بر حسب تابعی از دما و چگالی اتم های ناخالصی است . این اندازه گیری به روش حل معادله بولتزمن از طریق برگشت پذیری با طراحی یک کد کامپیوتری انجام گرفته است . به منظور مقایسه خواص ترابری این ماده ~~در~~جا لازم باشد ، خصوصیات ترابری محاسبه شده این ماده با دیگر مواد نیمرسانای مشابه اش نظیر InN و GaN مقایسه شده است . از آنجا که در تعیین پارامترهای الکتریکی هر ماده بلورین ، ساختار بلوری ، ساختار نواری و عوامل پراکندگی الکترونها مهمترین نقش را دارند ، لذا در این پروژه نیز مطالعه ای مروری بر خواص ساختار بلوری ، نواری و عوامل پراکندگی موثر در این ماده انجام شده است .

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	مقدمه
فصل اول - خواص عمومی جامدات	
۱۰	۱-۱- ساختار بلوری
۱۵	۱-۲- مدل الکترون آزاد
۱۸	۱-۳- شکست مدل الکترون آزاد
۱۹	۱-۴- ساختار نواری در جامدات
۲۰	۱-۵- طیف انرژی در اتمها و مولکولها
۲۳	۱-۶- تابع بلوخ
۲۵	۱-۷- نوارهای انرژی
۲۹	۱-۸- رابطه میان انرژی و بردار موج
۳۰	۱-۹- نظریه نواری در سه بعد ، مناطق بریلوئن
۳۱	۱-۱۰- مشاهده تجربی نوارهای انرژی
۳۲	۱-۱۱- روش های محاسبه نوارهای انرژی

فصل ۲- حرکت الکترون درون نیمرسانا و مکانیسم های پراکندگی

- ۴۰ ۲-۱- نظریه مقدماتی رسانندگی
- ۴۸ ۲-۲- مکانیسم های پراکندگی
- ۵۰ ۲-۳- پراکندگی الکترونی ناشی از ارتعاشات شبکه
- ۵۲ ۲-۳-۱- پراکندگی الکترونی در اثر فونون های آکوستیکی
- ۵۷ ۲-۳-۲- پراکندگی الکترونی در اثر فونون های اپتیکی
- ۶۰ ۲-۳-۳- پراکندگی الکترونی از حضور اتم های ناخالصی

فصل ۳- معادله ترابری بولتزمن

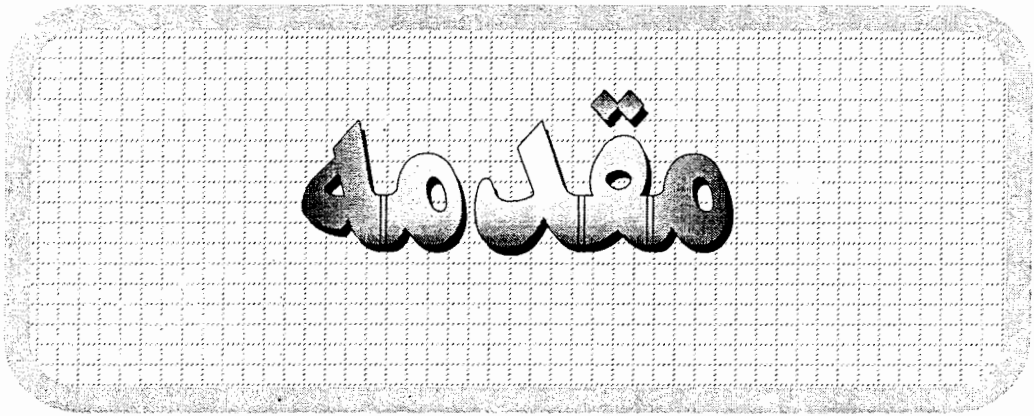
- ۶۴ معادله ترابری بولتزمن

فصل ۴- بررسی ساختار بلوری و نواری InGaN و نتایج و کارهای انجام شده

- ۷۲ ۴-۱- مقدمه
- ۷۴ ۴-۲- ساختار بلوری ترکیبات نیمرسانای InN , GaN و $\text{In}_{\frac{1}{2}}\text{Ga}_{\frac{1}{8}}\text{N}$
- ۷۹ ۴-۳- ساختار نواری ترکیبات نیمرسانای InN , GaN و $\text{In}_{\frac{1}{2}}\text{Ga}_{\frac{1}{8}}\text{N}$
- ۸۳ ۴-۴- محاسبه آهنگ پراکندگی در ترکیب نیمرسانای $\text{In}_{\frac{1}{2}}\text{Ga}_{\frac{1}{8}}\text{N}$
- ۹۰ ۴-۵- محاسبه تحرک پذیری در حد میدان الکتریکی ضعیف
- ۱۰۰ ۴-۶- کارهای آینده

منابع

ضمائم



مقدمه

منشأ نیمرساناها به زمان فارادی^(۱) و بکرل^(۲) بر می گردد. در سال ۱۸۳۳، فارادی کشف کرد که سولفیت نقره دارای یک ضریب گرمایی منفی است و در سال ۱۸۳۹ بکرل روی خواص الکترولیتهای مختلف مطالعه کرد. در ۱۹۴۸ بارتین^(۳) و باردین^(۴) در آزمایشگاه « بل » ایالات متحده، اولین ترانزیستور تماسی را که از ژرمانیوم ساخته شده بود، ساختند و فقط چند ماه بعد شوکلی^(۵) ترانزیستور اتصالی را ساخت که خیلی زود جای ترانزیستورهای « نقطه تماس » را گرفت و بعد از پیشرفتهای وسیع، از آن قطعه ای ساخته شد که امروزه آن را به عنوان ترانزیستورهای دو قطبی می شناسیم.

به دنبال پیشرفتهایی که در سال ۱۹۴۰ حاصل آمد، بر اهمیت نیمرساناها افزوده شد و اکنون به عنوان پایه الکترونیک جدید، حوزه استفاده وسیعی دارند. بیشتر نیمرساناهایی که در دسترس ما هستند، از ترکیبات مواد نیمرسانا ساخته شده اند. اغلب قطعات نیمرسانا که در مدارهای الکترونیکی وجود دارند عبارتند از: دیود، ترانزیستورهای اثر میدان، ترانزیستورهای دوقطبی، ریزموجها و فیبرهای نوری. سیلیکون Si معروفترین ماده نیمرسانایی است که در ساخت هر نوع قطعه نیمرسانایی در مدارهای الکترونیکی استفاده می شود. اگر چه دیگر آلیاژهای دو عنصری، مخصوصاً آنهایی که از عناصر گروه III و V جدول تناوبی تشکیل شده اند، برای موارد بسیار ویژه استفاده می شوند. همچنین علاوه بر ترکیبات دوتایی، ترکیبات سه تایی و چهارتایی از مواد نیمرسانا نیز وجود دارند و می توان آنها را برای بازده بهتر در بعضی از موارد

1-Faraday
2-Becquerel
3-Brattain
4-Bardeen
5-Schockley

خاص استفاده کرد. اخیراً از آلیاژ ژرمانیوم SiGe برای ساخت قطعات نیمرسانایی همانند انواع ترانزیستورهای اثر میدان که در آنها تولید الکترونهای با سرعت بالا اهمیت دارد، استفاده می شود. امروزه بجای SiGe از ترکیبات جدید نیترات دار GaN، AlN و InN نیز برای ساخت قطعات نیمرسانایی که در آنها سرعت ترابری الکترون در حد میدان های الکتریکی شدید بسیار بالاست، استفاده می شود. گروه مواد نیترات دار مجموعه ترکیبات نیمرسانای موثر و سودمندی را تشکیل می دهند. زیرا آنها با آلیاژهای AlGaIn، InGaIn و AlInN نیمرساناهایی را با گاف انرژی مستقیم از 1.9 eV (InN) تا 6.2 eV (AlN)، پدید می آورند. پتانسیل بالای این مجموعه عناصر در توان بالا، درجه حرارت بالا، فرکانس بالا و گسیل زیاد (نور - انرژی) اکنون به عنوان پیشرفتی عظیم در زمینه تکنولوژی مواد محسوب می شود. دیودهای نوری (LED)^(۱) که بر پایه مواد نیمرسانای نیترات دار ساخته شده اند توانایی تشعشع همه رنگها را دارند، زیرا تشعشع سه رنگ اصلی قرمز، سبز و آبی، توسط آنها امکان پذیر است. علاوه بر آن گسیل امواج نوری، با طول موجهای کوتاه، نشان می دهد که دیودهای لیزری ساخته شده از این مواد، تمرکز رنگی بیشتری دارند و در نتیجه می توانند توانایی ذخیره سازی را افزایش دهند. بطور مثال در دیسکهای مختلط دیجیتالی (DVD) زمانی که لیزرهای آبی GaN مورد استفاده قرار می گیرند در هر دیسک چگالی ذخیره سازی از یک گیگا بایت به ۴۰ گیگا بایت افزایش پیدا می کند. این ترکیبات نیمرسانا همچنین کاندیداهای خوبی برای استفاده در گیرنده های ماوراء بنفش هستند و موارد استفاده فراوانی^۲ تحقیقات خورشیدی و نظارت بر فرآیند احتراق دارند.

سرعت سوق بالای ترکیبات نیترات دار نظیر AlN، GaN و InN و دیگر ترکیبات ساخته شده از آنها نظیر AlGaIn و یا InGaIn و همچنین حساس نبودن پارامترهای الکتریکی این

ترکیبات به دما، باعث شده است که امروزه از این مواد در ساخت قطعات الکتریکی توان بالا و جریان های زیاد استفاده شود.

با این حال مشکلات پیچیده متعددی در رشد بلور این مواد وجود دارند که مهمترین آنها فقدان مواد مناسب برای ساختار زیر لایه هاست. مشکلات دیگری نیز در زمینه ترکیب این مواد وجود دارد. سختی ترکیب کردن GaN و نمونه های پتاسیم و کمبود اسید مناسب برای این مواد از این جمله اند. با این حال پیشرفتهای چشمگیری در چند سال اخیر در کیفیت مواد حاصل شده است. بهینه سازی لایه های مقاوم در صفحات یاقوتی و اخیراً در دسترس قرار گرفتن لایه های سیلیکون و یا کربن به مواد تشکیل دهنده اجازه می دهد که بوسیله روشهای مختلف رشد بلور از حالت مذاب و یا حالت تبخیر بتوان این مواد را تشکیل داد. همچنین با ترکیب ناخالصی های گیرنده و یا دهنده می توان GaN را به عنوان معرف همه ترکیبات غنی شده با چگالی ناخالصی در حد $3 \times 10^{24} m^{-3}$ قرار داد. بهبود در کیفیت رشد و مراحل ساخت مواد، محققان را بر آن داشت تا به خاطر تجاری کردن و استفاده بهینه از GaN تحقیقات را توسط منابع انرژی نوری انجام دهند. اولین دیود نوری ساخته شده از GaN در اوایل سال ۱۹۷۰ توسط پانکوف^(۱) ساخته شد. به علت وجود ناخالصی فسفر در ترکیبات رشد داده شده عموماً دیودهای نوری ساخته شده از نوع p-n بودند که حتی نسبت به قطعات فلز - نیمرسانا غیرمتعارف تر بودند. پیشرفتهایی که در همه جهات در تکنولوژی GaN بدست آمد، سرانجام امکان ساخت انواع قطعات ساخته شده از این مواد را در ترانزیستورهای اثر میدان بوجود آورد.

توسعه و پیشرفت GaN بر پایه عملکرد قطعات انتقال دهنده بنا شده است که در همان ابتدای راه به خاطر کیفیت پایین رشد بلور این مواد دچار محدودیت شد.

در تعیین خواص الکتریکی ترکیبات دوتایی و سه تایی نیترا ت دار عموماً از روش های تئوری و شبیه سازی استفاده می شود و این بدان جهت است که عموماً این ترکیبات دارای گاف انرژی بالایی بوده و ترابری الکترون در آنها به میدان های الکتریکی بسیار شدید نیاز دارد . امکان بررسی رفتار ترابری الکترونها در این مواد از طریق نظری باعث پیشرفت مطالعه خواص این مواد شده است ، بخصوص اینکه اینگونه مطالعات در زمان کمتر و با امکانات وسیعتری قابل بررسی است .

اندازه سرعت سوق الکترون در حد میدان های الکتریکی پایین و بالا در انتخاب یک ماده نیمرسانا در ساخت قطعات الکترونیکی بسیار مهم است . در مورد ترکیبات نیترا ت دار اولین بار لیثل جان^(۱) در سال ۱۹۷۶ با مطالعات نظری خود اندازه سرعت سوق الکترون را در ترکیب نیمرسانای GaN محاسبه نمود . محاسبات وی نشان داد که در ماده نیمرسانای GaN با چگالی ناخالصی $10^{22} m^{-3}$ و در حد میدان الکتریکی $2 \times 10^7 V/m$ ، سرعت سوق الکترونها به بزرگی $2 \times 10^5 m/s$ است ، که بطور قابل ملاحظه ای از سرعت سوق الکترونها در نیمرسانای Si یا GaAs بیشتر است . همچنین مطالعات وی نشان داد که سرعت سوق در GaN بر خلاف دیگر ترکیبات نیمرسانا نظیر Si یا GaAs به دما وابسته نبوده ، و در نتیجه این مواد در ساخت قطعات نیمرسانا دارای مزیت فراوانی می باشند .

خواص ترابری الکترون ها در ترکیبات دو و سه تایی نیمرساناهای نیترا ت دار در حد میدان های الکتریکی پایین اولین بار توسط رود^(۲) با حل معادله بولتزمن^(۳) به روش برگشت

1-Littlejohn

2- Rode

3-Boltzmann

پذیری انجام پذیرفت. هر چند که بعدها گاسکیل^(۱) با روش مونتوکارلو^(۲) خواص ترابری حامل ها را در این ترکیبات در حد میدان های الکتریکی پایین محاسبه نمود. در مطالعه خواص ترابری الکترون در حد میدان های الکتریکی پایین عموماً تحرک پذیری الکترون بر حسب تابعی از دما و چگالی الکترونها تعیین می شود. چنانکه می دانیم تحرک پذیری مهمترین عامل الکتریکی یک ماده نیمرساناست و با تعیین آن می توان به خواص الکتریکی ماده و کاربردهای آن در طراحی و ساخت قطعات نیمرسانا پی برد. موضوع این تحقیق نیز تعیین پارامترهای الکتریکی نظیر تحرک پذیری μ الکترونها در ماده نیمرسانای $\text{In}_{0.72}\text{Ga}_{0.28}\text{N}$ بر حسب تابعی از دما و چگالی الکترونها است. این اندازه گیری به روش حل معادله ترابری بولتزمن از طریق برگشت پذیر بوسیله یک برنامه کامپیوتری است. به منظور مقایسه خواص ترابری این ماده هر جا لازم باشد، خصوصیات ترابری محاسبه شده این ماده با دیگر مواد نیمرسانای سازنده اش نظیر GaN و InN مقایسه شده است. از آنجا که در تعیین پارامترهای الکتریکی هر ماده بلورین ساختار بلوری، ساختار نواری و عوامل پراکندگی الکترونها مهمترین نقش را دارند، لذا در این پروژه نیز ابتدا مطالعه ای مروری بر خواص ساختار بلوری، نواری و عوامل پراکندگی موثر در این ماده شده است. بنابراین ادامه این پروژه به روش زیر تقسیم بندی شده است.

در فصل اول بررسی اجمالی به خواص عمومی ترکیبات نیمرسانا، از دیدگاه ساختار بلوری و ساختار نواری می پردازیم. با توجه به آنکه عموماً ترکیبات نیمرسانای دوتایی و سه تایی نیترا ت دار در ساختار وورتسایت^(۳) و یا زینک بلند^(۴) متبلور می شوند، شناسایی و خواص بلوری این

1- Gaskill
2- Monte Carlo
3- Wurtzite
4- Zincblende

ساختار برای بررسی های آینده اهمیت فراوانی دارد. همچنین در این فصل اشاره ای به روش های مختلف تعیین ساختار نواری این ترکیبات می شود. نوع ساختار نواری این ترکیبات (مستقیم یا غیرمستقیم) و پارامترهای ساختار نواری این مواد از قبیل انحنای نوارهای رسانش و جرم موثر الکترون در دره های مختلف تأثیر بسیار فراوانی در تحرک پذیری الکترونها دارد. همچنین چون مطالعه اصلی این تحقیق در حد میدان های الکتریکی پایین است، شکل پایین ترین نوار رسانش و بخصوص دره مرکزی آن (Γ دره) و جرم موثر الکترون در آن تعیین کننده اصلی در سرعت سوق و تحرک پذیری الکترونها است، زیرا چنانکه می دانیم در حد میدان های الکتریکی پایین ($E < 1.05 \text{ V/m}$) تمامی الکترونها در دره مرکزی Γ بوده و لذا محاسبات انجام شده بر روی تعیین سرعت سوق و تحرک پذیری در همین دره است.

در فصل دوم، به مطالعات عوامل مختلف پراکندگی الکترونها تحت تأثیر میدان الکتریکی اعمالی می پردازیم. چنانکه می دانیم تحت تأثیر میدان الکتریکی اعمالی الکترونها با شتاب $a = \frac{eE}{m^*}$ در ساختار نواری به حرکت در می آیند ولی حرکت آنها تحت تأثیر عوامل مختلف پراکندگی است. در این فصل آهنگ پراکندگی الکترونها را در حضور پراکندگی از عوامل مختلفی چون، فونون های آکوستیکی^(۱) و اپتیکی^(۲)، پیزوالکتریسیته^(۳) و اتم های ناخالصی بررسی می کنیم. عامل پراکندگی پیزوالکتریسیته بدین دلیل در محاسبات منظور می شود که چون عموماً ترکیبات نیمرسانای نیترا دار نظیر $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ در ساختار وورتسایت متبلور شده و این ساختار به دلیل عدم تقارن دارای خاصیت پیزوالکتریسیته است. در این فصل روابط مربوط به هر

1-Acoustic Phonons

2-Optical Phonons

3-Piezoelectric

به هر آهنگ پراکندگی محاسبه شده و به منظور بررسی بیشتر در مورد ماده GaN تغییرات این آهنگ های پراکندگی بر حسب انرژی ترسیم شده است. در فصل نتایج نمودارهای مشابهی برای ترکیب نیمرسانای سه تایی $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ بررسی خواهد شد.

در فصل سوم به توضیح و تبیین معادله بولتزمن می پردازیم. حل و بحث این معادله در حد میدان های الکتریکی پایین و شرایط ایستا به روش عددی برگشت پذیر مورد بررسی قرار گرفته و نشان خواهیم داد که چگونه می توان از حل این معادله نهایتاً پارامتر الکتریکی تحرک پذیری را محاسبه کرد.

نهایتاً در فصل چهارم به نتایج به دست آمده از حل و بحث معادله بولتزمن برای تعیین خواص الکتریکی ترکیب سه تایی $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ می پردازیم.

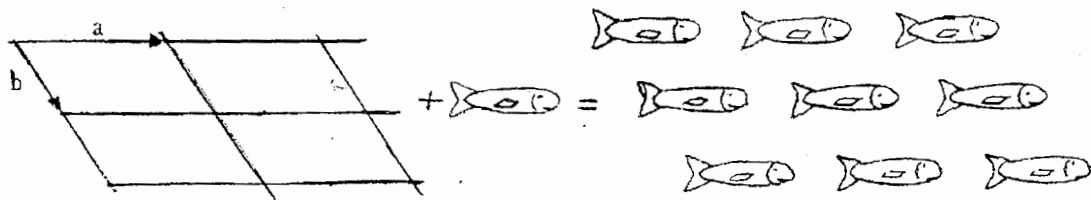
فصل اول

خواص عمومی جامدات

۱-۱- ساختار بلوری

با دیدن شکل خارجی جامدات و نظم موجود می توان به این نتیجه رسید که این نظم خارجی ناشی از نظم در آرایش اتم های تشکیل دهنده آنها است . عبارت دیگر اجسام بلوری باید یک آرایه سه بعدی از اتمها باشند . با کشف پرتو $X^{(۱)}$ و بررسی آثار تداخلی پرتوهای رونتگنی^(۲) ، نخستین مشاهدات تجربی پراش پرتو X توسط بلورها انجام پذیرفت . آزمایشات پراش پرتو X از بلورهای مختلف بطور قطعی ثابت کرد که بلورها آرایه ای سه بعدی از اتمها هستند .

بلور ایده آل از تکرار بی پایان واحدهای ساختاری همانند در فضا بوجود می آید . این واحد ساختاری در بلورهای ساده یک اتم است و در بلورهای پیچیده تر شامل چندین اتم و مولکول می باشد . ساختار بلوری بر حسب شبکه ای از نقاط که در هر نقطه آن گروهی از اتمها نشسته اند توصیف می شود . بطوریکه ساختار بلورین را می توان متشکل از مجموع شبکه بعلاوه پایه در نظر گرفت (شکل ۱-۱) که در آن شبکه یک آرایش منظم و دوره ای از نقاط در فضا است و پایه یک اتم یا مجموعه ای اتمها است که با قرار گرفتن آن در هر نقطه ای از شبکه ساختار بلور را تشکیل می دهد . پایه ها در ترکیب آرایش و سمتگیری اتمها کاملاً یکسانند .

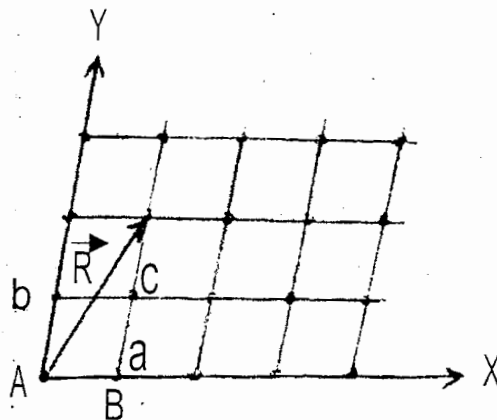


پایه + شبکه = ساختار بلور

شکل ۱-۱- ساختار بلور از نظر قرار گرفتن پایه ای از اتم های مشابه در محل نقاط شبکه تشکیل می شود [۱].

آرایش منظم اتمها در ماده وجه تمایز بلور با ماده آمورف است. اما بسیاری از دانشمندان بویژه فیزیکدانها مایلند جزئیات آرایش اتمی را نادیده بگیرند و حجم کوچکی از بلور را به صورت آرایه ساده مکعبی نمایش می دهند.

در یک بلور، اتمها به صورت منظم و تناوبی قرار می گیرند شکل (۲-۱). بطوریکه در یک بلور کامل این خاصیت تناوبی بودن در سه امتداد محورهای x ، y و z از $-\infty$ تا $+\infty$ حفظ می شود.



شکل ۱-۲- یک شبکه جامد دو بعدی در یک بلور دو بعدی، فاصله بین هر دو اتم مجاور در امتداد

محور x ها برابر a و در امتداد محور y ها برابر b است.

از تناوبی بودن شبکه بلوری می توان نتیجه گرفت که اتمهای A , B , C معادل هم هستند . در نتیجه می توان گفت بلور تقارن انتقالی دارد ، یعنی بلور تحت هر برداری مانند R قبل و بعد از انتقال دقیقاً یکسان است .

برای بلورهای سه بعدی ، بردار انتقال شبکه سه بعدی با رابطه $\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$

بیان می شود که در آن سه بردار $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ در یک صفحه نیستند و نقطه ای از شبکه را به نقاط همسایه اولش وصل می کنند .

سطح متوازی السطوحی که اضلاعش بردارهای $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ (که در یک جهت نبوده و بردارهای پایه نامیده می شوند) باشد ، سلول واحد^(۱) نامیده می شود . بنا بر این یک شبکه را می توان به عنوان ترکیبی از تعداد بسیاری از سلولهای واحد در نظر گرفت که پهلوی به پهلوی کنار هم چیده شده اند . در بلور شناسی خواص هندسی بلور بیش از خواص یک بلور اهمیت دارد . بنابراین می توان اتم ها را با نقاط هندسی معادل جایگزین کرد . بدین ترتیب نقشی بدست می آید که دارای خواص هندسی بلور است ولی محتوای فیزیکی ندارد . این نقش هندسی را شبکه بلوری می نامند . شبکه های بلوری را می توان در حالت کلی به دو گونه شبکه براوه و شبکه غیربراهه تقسیم بندی نمود ، بطوریکه در یک شبکه براوه^(۲) تمام نقاط شبکه معادل یکدیگرند و چنین شبکه ای است که می تواند خواص جامدات بلورین را توصیف کند .

این شبکه در سال ۱۸۴۸ میلادی توسط شخصی بنام براوه (A-Bravais) پیشنهاد شده است که اختلاف آنها در زاویه بین سه امتداد حرکت بردارهای $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ و اندازه این بردارهاست . شبکه غیر براوه را می توان ترکیبی از دو یا چند شبکه براوه دانست که در هم فرو رفته اند و جهتشان

نسبت به یکدیگر ثابت است. چهارده شبکه براوه به هفت سیستم بلوری گروه بندی می شوند. این سیستم ها عبارتند از:

سه میلی (Triclinic)، شش گوشه (Hexagonal)، مکعبی (Cubic)، چهار گوشه (Tetragonal)، راست گوشه (Ortorombic)، تک میلی (Monoclinic) و سه گوشه (Trigonal). مشخصات ساختاری و هندسی این سیستم های بلوری در هر کتاب بلورشناسی و یا حالت جامد پایه ذکر شده است.

چنانکه می دانیم جامدات ساختار پایداری دارند، مثلاً یک بلور Ge از مجموعه ای از اتم های Ge پایدارتر است. این موضوع بیانگر این مطلب است که وقتی اتمهای Ge به هم نزدیک شوند، یکدیگر را جذب می کنند. یعنی یک نیروی جاذبه بین اتمی وجود دارد که اتمها را کنار هم نگه می دارد.

نیروی بین اتمی ترکیبی از دو نیروی جاذبه و دافعه اتمی است (پتانسیل لنارد جونز)^(۱)، نیروی جاذبه در فواصل بزرگ نیروی غالب است و نیروی دافعه در فواصل کوچک اثر می کند. وجود نیروی جاذبه بین اتمی ناشی از پیوند اتمها در جامدات است. این نیروها، پیوندهای بین اتمی در جامدات را تشکیل می دهند که مسئول پایداری بلورها می باشند. بسته به منشا نیروهای پیوندی، چندین نوع پیوند وجود دارد که مهمترین آنها عبارتند از: پیوند یونی، پیوند کووالان و پیوند فلزی.

اطلاعات بسیاری که از بررسی ساختار بلورهای حقیقی بدست آمده است، نشان می دهد که ساختار درونی بلورها، به ساختار یک بلور ایده آل شباهت ندارد. آنچه درباره شبکه بلور و آرایش اتمها گفته شد، تنها در صورتی صادق است که اتمها دقیقاً در مکانهای صحیح خود در بلور

قرار داشته باشند. اما بلورهای حقیقی دارای ساختار موزاییکی هستند و از قطعات منظمی تشکیل شده اند که تقریباً موازی هم می باشند. ابعاد این قطعات بین 10^{-6} تا 10^{-8} متر تغییر می کند و زاویه بین آنها نیز از چند ثانیه تا ده ها دقیقه متغیر بوده، و بین آنها لایه ای انتقالی وجود دارد. از این رو شبکه تغییر شکل پیدا کرده و در نتیجه ناراستیهایی^(۱) در شبکه بوجود می آید.

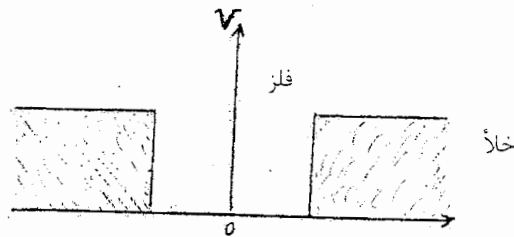
شاید تصور شود که حضور ناراستی ها تأثیر زیادی بر خواص ساختاری و الکتریکی ماده ندارد. اما روشن شده است که وجود برخی ناراستی ها در شبکه، تأثیر اساسی در بسیاری از خواص مهم جامدات از قبیل مقاومت الکتریکی و استحکام مکانیکی دارد.

در بلور دو نوع ناراستی هندسی عمده یافت می شود. در یکی از آنها، ناراستی بسیار جایگزیده و دارای ابعاد اتمی است، اینها را ناراستی های نقطه ای می گویند که واضحترین مثال آن حضور اتم های ناخالصی است. ناراستی های دیگری نیز یافت می شوند که مهمترین آنها در رفتگی^(۲) است. علاوه بر ناراستی های استاتیکی، ارتعاشهای گرمایی نیز کامل بودن آرایش شبکه را بر هم می زند، که البته در دماهای بالا اهمیت دارند. حضور ناراستیها بی نظمی بلور را افزایش می دهد (یعنی آنتروپی را زیاد می کند). به هر حال برای آنکه بتوان حرکت الکترونها را در بلور بررسی نمود نیاز به شناسایی ساختار اتمی بلورها داریم. روش های متعدد و فراوانی برای بررسی ساختار اتمی بلورها وجود دارد که ساده ترین آنها مدل کلاسیکی الکترون آزاد است.

۱-۲ - مدل الکترون آزاد^(۱)

بیشتر خواص فیزیکی فلزات مشترک است، مانند مقاومت فیزیکی زیاد، چگالی زیاد، رسانایی الکتریکی و حرارتی خوب و بازتاب زیاد اپتیکی. تمام این خواص را می توان با فرض اینکه فلزات شامل تعداد زیادی الکترون تقریباً آزاد بوده که می توانند آزادانه در داخل بلور حرکت کنند، درک کرد.

وقتی اتمهای آزاد گرد هم می آیند و باعث شکل گیری یک فلز می شوند، الکترونهای ظرفیت اتمها به الکترونهای رسانش تبدیل می شوند و حالتهاى آنها کاملاً تغییر می کند. در حالیکه الکترونهای داخلی جایگزیده باقی می مانند و مشخصه آنها اساساً بدون تغییر می ماند. درست همانگونه که الکترونهای ظرفیت مسئول خواص شیمیایی هستند، الکترونهای رسانش نیز مسئول اکثر خواص فلزاتند. در تقریب الکترون آزاد از نیروهای بین الکترونهای رسانش و مغزهای یونی چشم پوشی می شود. در اینجا فرض می شود که الکترونهای رسانش کاملاً آزادند و فقط یک پتانسیل در سطح نمونه بر آنها اعمال می شود (شکل ۳ - ۱). در این تقریب از این واقعیت که یک اتم با از دست دادن یک الکترون به صورت یک یون مثبت باقی می ماند، چشم پوشی می شود (این ایده اصلی در مدل الکترون در جعبه است). در نتیجه اعمال پتانسیل فوق الذکر، الکترونها در داخل نمونه محبوس می شوند.



شکل ۱-۳ - پتانسیل در مدل الکترون آزاد

بر طبق این مدل ، بجز بازتابهای نادری که الکترونها از سطح نمونه می کنند ، الکترونهای رسانش ، بدون هیچ برخوردی در داخل نمونه حرکت می کنند . این رفتار خیلی شبیه رفتار یک گاز ایده آل است . و لذا به همین دلیل این مدل به مدل گاز الکترون آزاد نیز مشهور است .

میتوان از حل معادله موج شرودینگر برای این مدل (که همان ذره در جعبه است) انرژیهای ممکن E را برای الکترون محبوس در جعبه ، که در اینجا همان بلور است ، محاسبه نمود . معادله شرودینگر در فضای سه بعدی عبارتست از :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) = E\psi \quad ۱-۱$$

که در آن ψ تابع موج الکترون آزاد است . از حل این معادله انرژی الکترون در بلور بصورت

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

بدست می آید که در آن k بردار موج الکترون و m جرم آن است .

تعداد الکترونهای رسانش را می توان با توجه به ظرفیت و چگالی فلز محاسبه کرد . چگالی

الکترونی یعنی تعداد الکترونها در واحد حجم از رابطه زیر بدست می آید :

$$N = Z \frac{\rho_m N_A}{M'} \quad ۱-۲$$

که در این رابطه ρ_m چگالی ماده ، M' وزن اتمی ، N_A عدد آووگادرو و Z_v ظرفیت اتمی است .

طبق این مدل ، جریان الکتریکی در اثر حرکت الکترونیهای رسانش در بلور بوجود می آید و یون ها به دلیل جرم زیاد هیچگونه تحرکی از خود نشان نمی دهند . لذا این مدل منجر به قانون معروف اهم ، $V=RI$ می شود که در آن R مقاومت الکتریکی شبکه بلوری است .

با استفاده از این مدل می توان پیش بینی کرد که مقاومت الکتریکی فلزات متشکل از دو جمله است که یکی به دما بستگی داشته و دیگری مستقل از آن است . وجود چنین وابستگی های به دلیل حضور نواقص و ناراستیهای بلوری است . ماتیسین^(۱) نشان داد که جمله مستقل از دما به دلیل حضور اتم های ناخالص در شبکه بلوری است که باعث پراکندگی الکترونها می شود و جمله وابسته به دما به دلیل پراکندگی الکترونها از فونون ها^(۲) (ارتعاشات شبکه) است .

با استفاده از مدل الکترون آزاد می توان برخی از خصوصیات فلزات را توجیه کرد . از جمله آنها ، ظرفیت گرمایی ، رسانایی حرارتی ، تشدید سیکلوترونی ، انرژی فرمی ، گسیل گرما یونی و ... است . همچنین خواص اپتیکی (جذب و بازتابش بلور) فلزات را می توان توسط این مدل به خوبی توضیح داد .

۳-۱ - شکست مدل الکترون آزاد

مدل الکترون آزاد فقط یک مدل تقریبی بوده و دارای محدودیت هایی است . مهمترین نارسایی های مدل الکترون آزاد را می توان به صورت زیر بیان کرد :

الف- این مدل پیشنهاد می کند رسانندگی الکتریکی مواد بلورین به چگالی الکترونی آنها وابسته است ، ولی تجربه نشان می دهد که فلزات دو ظرفیتی- و سه ظرفیتی بطور قابل ملاحظه ای از فلزات یک ظرفیتی رسانایی کمتری دارند ، هر چند فلزات دو یا سه ظرفیتی چگالی الکترونی بیشتری دارند .

ب- مدل الکترون آزاد همیشه یک ضریب هال منفی را پیش بینی می کند ، در حالی که ثابت هال بعضی از فلزات مانند Cd ، Zn و Be مثبت است .

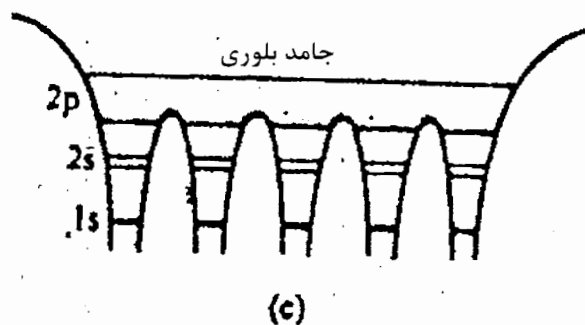
ج- این مدل نمی تواند تمایز بین فلزات ، نیمه فلزات ، نیمرساناها^(۱) و عایقها را توجیه کند .
د- اندازه گیری سطح فرمی^(۲) بر این نکته دلالت دارد که شکل این سطح اغلب غیرکروی است ، که این مطلب با مدل الکترون آزاد که یک سطح فرمی کروی را پیش بینی می کند ، تناقض دارد .

هـ- رابطه الکترونیهای رسانش در فلزات با الکترونیهای ظرفیت اتمهای آزاد ، توسط مدل الکترون آزاد توضیح داده نمی شود .

این مشکلات و برخی مسائل دیگر ، نیاز به یک تئوری جامع تر را مطرح می کند که در زیر به آنها می پردازیم .

۵-۱- طیف انرژی در اتمها و مولکولها

برای توصیف کلی طیف انرژی الکترون درون یک جامد بلوری، بهتر است بحث را با بررسی طیف یک اتم آغاز کنیم و ببینیم وقتی این اتمها گرد هم می آیند تا یک جسم جامد را تشکیل دهند، چگونه این طیف تغییر می کند و شکل طیف انرژی چگونه است. چنانکه می دانیم هر کدام از ترازهای اتمی به N زیر تراز نزدیک به هم شکافته می شود که N تعداد اتمهای موجود در جامد است. از آنجا که N خیلی بزرگ است زیر لایه ها آنچنان به هم نزدیکند که به هم می پیوندند و یک نوار انرژی را تشکیل می دهند. بدین ترتیب همانگونه که در شکل ۵-۱ نشان داده شده است، ترازهای $1s^2, 2s^2, 2p^6, \dots$ را به ترتیب نوارهای $1s, 2s, 2p$ را تشکیل می دهند.



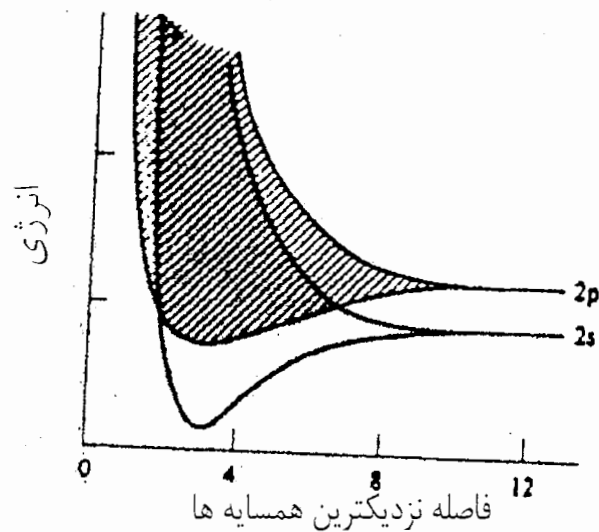
شکل ۵-۱- ترازهای $1s^2, 2s^2, 2p^6, \dots$ که به ترتیب نوارهای $1s, 2s, 2p$ را تشکیل می دهند. [۳]

برای اینکه نشان دهیم زیر لایه ها در یک نوار چقدر به هم نزدیکند، مثال عددی زیر را در نظر می گیریم. فرض کنید پهنای نواری نوعی 5 eV باشد، در اینصورت بازه انرژی بین دو تراز مجاور از مرتبه $5 \times 10^{-23}\text{ eV}$ خواهد بود [۳] و از آنجا که این مقدار بینهایت کوچک است،

زیر لایه ها از یکدیگر قابل تشخیص نیستند و می توانیم توزیع آنها را به صورت نوارهای انرژی پیوسته در نظر بگیریم .

در مجموع می توان گفت طیف یک جسم جامد ، ترکیبی از نوارهای انرژی است . نواحی میانی که این نوارها را از هم جدا می کند ، گافهای انرژی^(۱) یا نواحی ممنوع انرژی هستند که الکترونها نمی توانند آنها را اشغال کنند . بر عکس چنین وضعیتی ، حالت مربوط به یک اتم یا مولکول است که انرژی های مجاز ، مجموعه ای از ترازهای گسسته را تشکیل می دهند . قرار گرفتن این ترازهای انرژی در نوارهای انرژی ، یکی از خواص اساسی و مهم یک جسم جامد است . پهنای این نوارها متغیر است ولی در حالت کلی هر چه انرژی نوار بیشتر باشد ، پهنای آن نیز بیشتر است . زیرا یک حالت انرژی زیاد ، متناظر با یک شعاع اتمی زیاد و بنابراین پخشیدگی زیاد است که منجر به پهن شدن تراز انرژی می گردد . متقابلاً حالت های انرژی پایین متناظر با مدارهای کاملاً مقید می باشند که از پخشیدگی خیلی کم متأثر می شوند .

در شکل ۶-۱ نوارهای انرژی $2s$ ، $2p$ برای لیتیوم فلزی نشان داده شده است ، چنانکه ملاحظه می شود پهن شدگی نوارها به صورت تابعی از ثابت شبکه رسم شده است . همانطور که انتظار داریم ، با کاهش ثابت شبکه پهنای نوار افزایش می یابد ، زیرا هر چه فواصل بین اتمی کوچکتر باشد ، پخشیدگی بیشتر است .



شکل ۶-۱- پهن شدگی ترازهای ۲s، ۲p درون نوارهای انرژی در یک بلور لیتیوم (α شعاع بوهر یعنی

$$A^\circ / 0.53 \text{ است}) [۳]$$

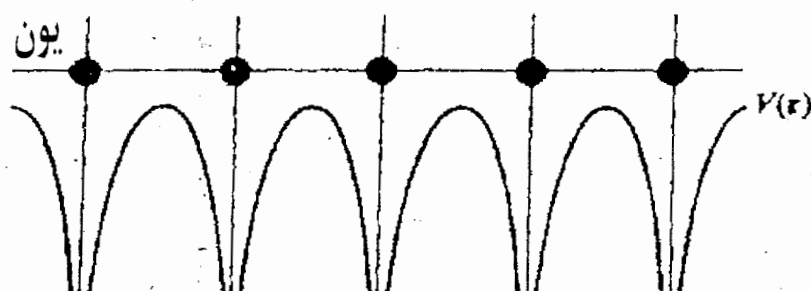
بر خلاف اوربیتالهای اتمی که در اطراف اتم خاصی جایگزیده اند و با دور شدن از اتمها بطور نمایی کاهش می یابند، اوربیتالهای بلوری (یعنی توابع موجی که حالت‌های الکترونی را در نوارها توصیف می کنند)، در تمام جامد گسترش دارند. بر این اساس از توابع موج جامدات به عنوان اوربیتالهای جایگزیده نشده یاد می کنیم. این اوربیتالها در واقع امواج الکترونی رونده در جامدات را توصیف می کنند. مفهوم جایگزیده نشدن، یک مفهوم اساسی است، این مفهوم، مسئول تمام پدیده های ترابری الکترونی در جامدات مانند رسانایی الکتریکی و گرمایی است.

۱-۶- تابع بلوخ^(۱)

رفتار الکترون در یک جامد بلوری با معادله شرودینگر، مطالعه می شود. این معادله را می توان به صورت زیر در نظر گرفت:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \Psi(r) = E \Psi(r) \quad ۱-۳$$

که در آن $V(r)$ پتانسیل بلور است که توسط الکترون دیده می شود، $\Psi(r)$ و E به ترتیب تابع حالت و انرژی این الکترون اند. پتانسیل $V(r)$ شامل برهم کنش الکترون با تمام اتمها در جسم جامد و همینطور برهم کنش بین الکترونهای دیگر است، که به دلیل تناوبی بودن شبکه بلوری خود دارای خاصیت تناوبی است. این پتانسیل متناوب در شکل ۱-۷ نشان داده شده است.



شکل ۱-۷ - پتانسیل تناوبی موجود در شبکه بلوری [۳]

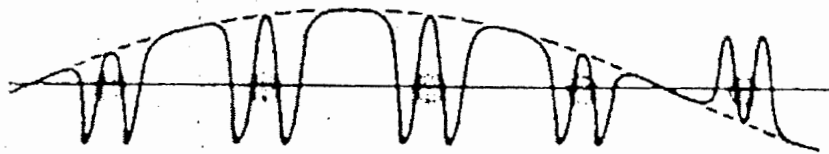
بر طبق قضیه بلوخ، حل معادله شرودینگر برای یک پتانسیل متناوب $V(r)$ به صورت زیر است:

$$\Psi_k(r) = e^{ik \cdot r} U_k(r) \quad ۱-۴$$

که در آن تابع $U_k(r)$ همان تقارن انتقالی شبکه را دارد. یعنی می توان نوشت:

$$U_k(r+R) = U_k \quad ۱-۵$$

تابع $U_k(r)$ به تابع بلوخ معروف است. این تابع به شکل یک موج تخت رونده است و این نکته دلالت بر این دارد که الکترون در بلور مانند یک ذره آزاد منتشر می شود. اثر تابع $U_k(r)$ مدوله کردن^(۱) این موج است. (شکل ۸ - ۱)



شکل ۸-۱- نمایشی از موج یا تابع بلوخ [۳]

چون الکترون مانند یک موج با بردار k در داخل شبکه بلوری رفتار می کند لذا می توان به

آن طول موج دوبروی^(۲) $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ نسبت داد و بنابراین اندازه حرکت آن $P = \hbar k$ است.

همچنین تابع $\Psi_k(r)$ ، یک اوربیتال بلوری است و در اطراف اتم خاصی جایگزیده نشده است، لذا می توان نتیجه گرفت که الکترون متعلق به همه بلور است. این مطلب با این خاصیت که الکترون را به صورت یک موج رونده، توصیف کردیم سازگار است.

۷-۱ - نوارهای انرژی^(۱)

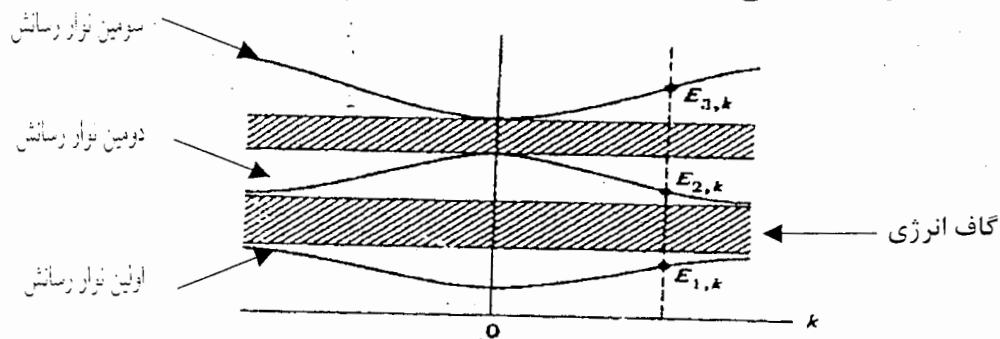
از حل معادله شرودینگر می توان طیف انرژی های ممکنه را در ساختار بلوری بدست آورد .

معادله شرودینگر را با جایگزینی $\Psi_k(r)$ از رابطه بلوخ و حذف e^{ikr} ، پس از انجام عملیات لازم

می توان به شکل زیر بازنویسی کرد :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla + ik)^2 + V(r) \right] U_k(r) = E_k U_k(r) \quad ۱-۶$$

این معادله یک معادله ویژه مقداری است . در اینجا هم ویژه تابع و هم ویژه مقدار به k یعنی بردار موج الکترون در شبکه بلوری وابسته است . یک معادله ویژه مقداری ، به چندین حل منجر می شود بطوریکه برای هر مقدار k چندین جواب بدست می آید که مجموعه ای از انرژی های گسسته را تشکیل می دهند . چون این انرژی ها به k وابسته است ، با تغییر k به صورت پیوسته تغییر می کنند . همانطور که در شکل ۹-۱ نشان داده شده است هر تراز به یک نوار انرژی منجر می شود . بنابراین انرژی ویژه مقدار را به صورت $E_n(k)$ می نویسیم ، که در آن اندیس n ضریب نواری نامیده می شود .



شکل ۹-۱ - گافها و نوارهای انرژی [۲۴]

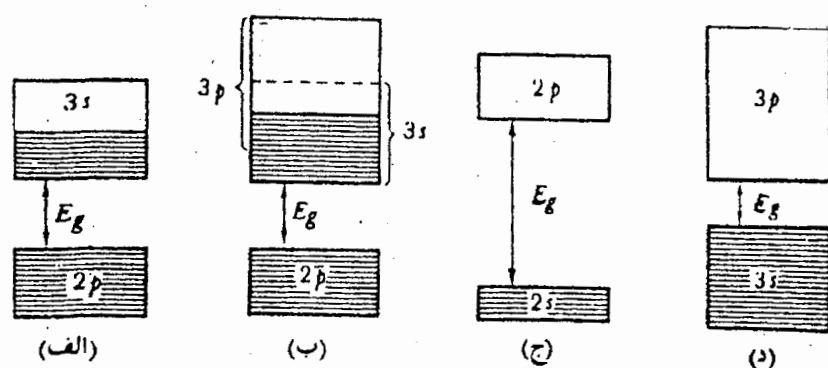
عموماً تعداد نوارها زیاد و بینهایت است، و فقط پایینترین نوارها توسط الکترونها اشغال می شوند. هر نوار یک ناحیه انرژی معین را می پوشاند که وقتی در فضای k رسم شود، از پایینترین تا بالاترین مقادیر انرژی را در بر می گیرد. بازه هایی از انرژی که نوارهای انرژی را از هم جدا کرده اند، گافهای انرژی نامیده می شود، که نواحی انرژی ممنوعه می باشند، یعنی در این مکان ها الکترون نمی تواند حضور داشته باشد.

از آنجا که k یک کمیت برداری است، شکل ۹ - ۱ ترسیمی از نوارهای انرژی در یک جهت بخصوص از فضای k را نشان می دهد. اگر این نوارها در جهات گوناگون k رسم شوند در حالت کلی شکل آنها تغییر خواهد کرد. بنابراین برای نمایش کامل نوارها لازم است نوارهای انرژی را در تمامی فضای k تعیین نماییم. بین نوارهای انرژی که از این تجزیه و تحلیل بدست می آید و ترازهای اتمی که از آنها ناشی می شود، یک تناظر یک به یک برقرار است.

هر نوار انرژی تعداد محدودی تراز انرژی دارد. طبق اصل طرد پائولی، هر تراز انرژی نمی تواند بیش از دو الکترون داشته باشد. با توجه به تعداد محدود الکترونها در یک جامد، فقط نوارهای با انرژی کمتر ممکن است پر شوند. بر حسب کیفیت اشغال نوارها توسط الکترونها، در دمای صفر کلوین کلیه جامدات را می توان به دو گروه بزرگ طبقه بندی کرد. گروه اول شامل اجسامی است که بالاتر از نوار کاملاً پر آنها، نواری وجود داشته باشد که به طور جزئی پر است (شکل ۱۰ - ۱ الف). این نوارهای غیر پر از آن دسته ترازهای اتمی تشکیل شده است که خودشان تکمیل نیستند (فلزات قلیایی). همچنین یک نوار غیر پر ممکن است از یک نوار کاملاً پر و یک نوار خالی یا یک نوار غیر کامل هم تشکیل شود. (مانند برلیوم و فلزات قلیایی خاکی، (شکل ۱۰ - ۱ ب). فلزات دارای نوارهایی هستند که بطور جزئی پر شده اند.

گروه دو شامل اجسامی است که در بالای نوار کاملاً پر آنها نوارهای کاملاً خالی وجود داشته باشد. (شکل ۱۰ - ۱ - ج و د) نمونه چنین اجسامی عناصر گروه چهار جدول تناوبی مانند کربن به صورت الماس، سیلیسیوم، ژرمانیوم و قلع خاکستری که ساختار الماسی را دارند، می باشد. این گروه همچنین بعضی از ترکیبات شیمیایی اکسیدهای فلزی، نیترات ها، کربورها و ترکیبات هالوژنه فلزات قلیایی و غیره را در بر می گیرد.

طبق نظریه نواری، الکترونهای خارجی ترین نوار انرژی عملاً آزادی بیشتری در حرکت دارند و فرقی نمی کند که جسم جامد، فلز یا عایق باشد. حرکت الکترون از یک اتم به اتم دیگر بر حسب پدیده تونل زنی^(۱) انجام می شود. علی رغم این واقعیت اختلافی در حدود چندین مرتبه نمایی بین خواص الکتریکی آنها وجود دارد، بخصوص در خواص رسانایی الکتریکی اجسامی از این دو نوع تفاوت بزرگی مشاهده می شود.



شکل ۱۰-۱ - اشغال نوارها توسط الکترونها

الف و ب - نوار غیر پر در بالای نوار پر، ج و د - نوار تهی در بالای نوار پر [۳]

در فلزات رسانندگی عموماً از مرتبه $\sigma = 10^7 (\Omega^{-1} \text{cm}^{-1})$ و در بهترین نارساها رسانندگی عموماً کوچکتر از حد $\sigma (10^{-11} (\Omega^{-1} \text{cm}^{-1}))$ است. برای درک بیشتر مکانیسم هدایت الکتریکی جامدات به بررسی رفتار الکترونها تحت تأثیر یک میدان خارجی در نوارهای انرژی پر و نیمه پر می پردازیم.

فرض کنیم میدان الکتریکی خارجی E را بر بلوری اعمال کنیم. این میدان هر الکترون را تحت تأثیر نیروی $F = eE$ قرار داده و تقارن موجود در توزیع سرعت الکترونها را بر هم می زند، زیرا سرعت الکترونهايي که برخلاف جهت این نیرو حرکت می کنند کم شده و سرعت آنهايي که هم جهت با نیرو هست بیشتر می شود. این گونه کند یا تند شدن حرکت موجب تغییر انرژی الکترون شده و باعث می گردد که الکترونها به حالات دیگری با انرژی کمتر یا بیشتر درآیند. این امر وقتی محقق می شود که نوار کاملاً پر نباشد. در چنین وضعی حتی یک میدان الکتریکی ضعیف هم قادر است به الکترونها ممنتم اضافه لازم را بدهد تا الکترون به تراز آزاد نزدیکش برود. حرکت عمومی الکترونها در خلاف جهت میدان الکتریکی جریان الکتریکی را نتیجه می دهد، و چنین جامداتی می توانند رساناهای خوبی را تشکیل دهند.

اگر نوار ظرفیت بلور کاملاً پر بوده و از نوار خالی مجاورش با گاف انرژی E_g جدا شده باشد، (شکل ۱۰ - ۱ - ج) در چنین بلوری میدان خارجی توانایی آن را ندارد که نوع حرکت را در نوار ظرفیت تغییر دهد. زیرا این میدان اعمالی توانایی آنرا ندارد که الکترونهای نوار ظرفیت را به نوار خالی بالاتر بفرستد. همچنین این میدان قادر نخواهد بود که در خود نوار ظرفیت که تراز خالی در آنها وجود ندارد، تغییری در نحوه توزیع الکترونها بدهد، و از این طریق توزیع الکترونها را به هم بزند. بنابراین در چنین اجسامی، میدان خارجی قادر به ایجاد حرکت جهت دار الکترونها نبوده و نتیجتاً هدایت الکتریکی چنین اجسامی عملاً صفر خواهد بود.

پس برای اینکه جسمی دارای رسانایی الکتریکی زیاد باشد باید در طیف انرژی خود، نوارهای نسبتاً خالی داشته باشد، چنانچه در مورد فلزات مشاهده می شود. (شکل ۱۰-۱- الف و ب) عدم وجود چنین نوارهایی در جامدات متعلق به گروه دوم، باعث می شود که نارسانهای الکتریکی باشند، علی رغم اینکه این اجسام دارای الکترونیایی هستند که با اتمهای خودشان بطور ضعیف پیوند دارند.

جامدات گروه دوم را معمولاً به دو دسته نارسانا و نیمرسانا تقسیم می کنند، این تقسیم بندی بر حسب عرض گاف انرژی آنها می باشد، نارسانا جامداتی را شامل می شوند که اندازه گاف انرژی آنها نسبتاً زیاد است، معمولاً برای آنها $E_g > 4\text{eV}$ است و نیمرساناها شامل جامداتی اند که اندازه گاف انرژی آنها بسیار کم است، (شکل ۱۰-۱- د). برای نیمرساناها E_g کمتر از ۴ الکترون ولت است، بطور مثال برای ژرمانیوم $E_g \geq 0.66\text{eV}$ و در سیلیسیوم $E_g \geq 1.18\text{eV}$ است.

۸-۱- رابطه میان انرژی و بردار موج

در اینجا لازم است درباره رابطه بین E و k در نزدیکی قله، مثلاً نوار اول با تفصیل بیشتری بحث شود. در مکانیک کوانتومی سرعت یک ذره با سرعت گروه $\frac{d\omega}{dk}$ ^(۱) مشخص می شود که سرعت انتقال انرژی نیز هست، $(E \cong \hbar\omega)$.

سرعت الکترون با شیب منحنی $E - k$ متناسب است. بنابراین ملاحظه می شود که با شروع از نقطه $k = 0$ ، سرعت ابتدا با زیاد شدن E ، زیاد می شود که ناشی از افزایش انرژی

جنبشی الکترون است، اما در نزدیکی قله شیب منحنی کم می شود. لذا با وجود اینکه انرژی هنوز در حال افزایش است، سرعت کاهش می یابد این بدان علت است که شدت برهم کنش الکترون با پتانسیل دوره ای شبکه قابل ملاحظه است. در لبه نوار $\frac{d\omega}{dk}$ و در نتیجه سرعت الکترون صفر است. اما این امر ایجاب نمی کند که الکترون ساکن باشد بلکه بدین معنی است که حرکت الکترون در جهت های + و - به یک اندازه محتمل است، در نتیجه مقدار چشمداشتی سرعت صفر است.

۹-۱ - نظریه نواری در سه بعد، مناطق بریلوئن

چون k کمیتی برداری است، لبه نوارها باید با مرزهای یک شکل سه بعدی در فضای k توصیف شوند، چنین شکلی را منطقه بریلوئن^(۱) گویند. شکل این منطقه با ساختار هندسی شبکه انتقال تعیین می شود و ابعاد آن به ثابت شبکه a بستگی دارد.

برای ترسیم مناطق بریلوئن می توان هر نقطه در شبکه وارون را به عنوان یک مرکز اختیار کرده و سپس عمود منصف خطوطی که آن نقطه را به همه نقاط موجود در اطراف شبکه وارون وصل می کنند، ترسیم نمود. شکلهایی که بدین ترتیب ایجاد می شوند، مناطق بریلوئن نامیده می شوند.

منطقه بریلوئن شبکه مکعبی ساده، به صورت مکعب ساده ای به ضلع $\frac{2\pi}{a}$ است. خارج از منطقه اول منطقه دومی وجود دارد که با آن دسته از مقادیر k محصور می شود که در دومین گاف انرژی اند و به همین ترتیب الی آخر برای دیگر مناطق بالاتر.

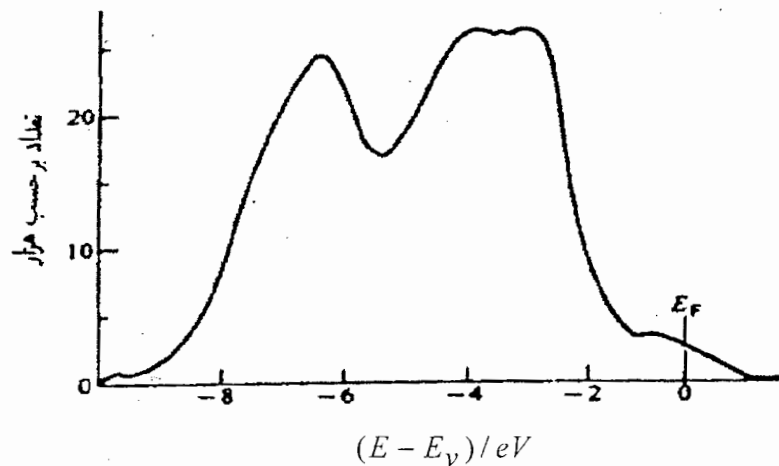
سطوح با انرژی ثابت را باید در داخل این منطقه ها ترسیم کنیم . به ازای مقادیر کوچک k این سطوح درست مانند حالت الکترون آزاد کروی اند و الکترونها حالتی را که داخل این کره قرار دارند پر می کنند . مرکز این کره در وسط منطقه ^(۱) واقع است . نزدیک لبه منطقه ، سطوح با انرژی ثابت واپیچیده می شوند ، یعنی E علاوه بر بزرگی به جهت k نیز بستگی پیدا می کنند .

۱۰-۱ - مشاهده تجربی نوارهای انرژی

شکل نوارهای انرژی در فلزات نخستین بار از طیفهای پرتو X استنتاج شد و با تصحیحاتی که در این روش انجام گرفت ، قدرت تفکیک بسیار خوبی بدست آمد . امروزه روش بسیار پر قدرتی برای تعیین انرژی ها و شکل تمام حالتها در اتم یا یون با دقتی فوق العاده بالا پیدا شده است . این روش گسیل فوتون فتوالقائیده (یا پرتو X) است .

در این آزمایشها ، نمونه تحت تابش پرتو X و یا فرابنفش با انرژی معین و دقیق E قرار می گیرد که برای کندن الکترون از بلور به اندازه کافی بزرگ است . انرژی جنبشی E_k این الکترونهای گسیل شده در طیف سنج بسیار دقیق پرتو β اندازه گیری می شوند .

بنابراین انرژی لازم برای کندن الکترون از اتم یا یون برابر $E_i = E - E_k$ است . از این روش می توان برای اندازه گیری بسیار دقیق ترازهای تیز داخل اتم و نیز شکل نوارها استفاده کرد . (شکل ۱-۱۱) با این روش تنها الکترونهایی که تا عمق 2nm هستند ، قابل شناسایی اند . لذا اطلاعات بدست آمده تنها به لایه های سطحی اتمها محدود می شود .



شکل ۱۱-۱ نوار خارجی که با اندازه گیری های گسیل فوتون فتوالقائیده تعیین شده است. این نوار از

همپوشانی نوارهای $5d$ و $6s$ تشکیل شده است. [۴]

۱۱-۱- روش های محاسبه نوارهای انرژی

روشهای متفاوتی برای محاسبه نوارهای انرژی در جامدات بلورین وجود دارد که در زیر

معروف ترین این روشها را بررسی می کنیم :

الف-مدل الکترون تقریباً آزاد^(۱)

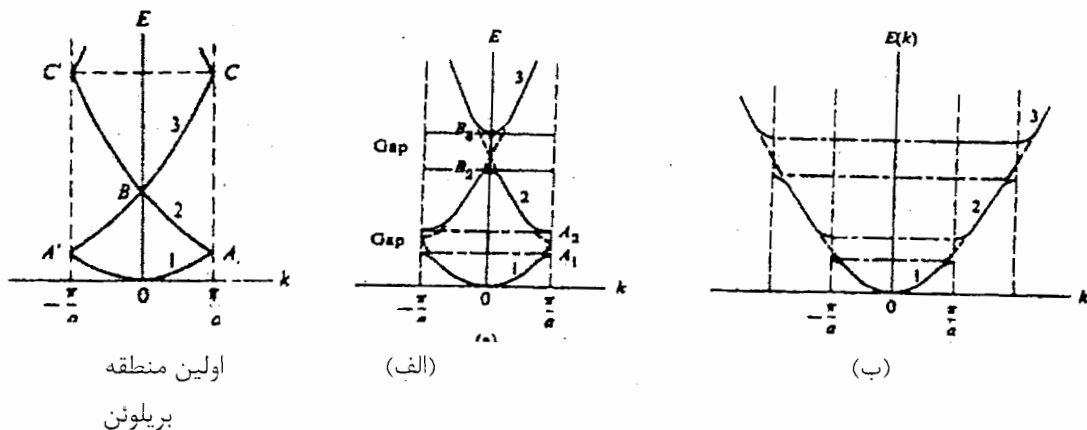
ساختار نواری بلورها را اغلب می توان با مدل الکترون تقریباً آزاد توصیف کرد. در این مدل

الکترون های نوار رسانش به گونه ای بررسی می شوند که گویی تنها به طور ضعیفی توسط

پتانسیل دوره ای مغزهای یونی مختل می شوند. بر اساس این مدل اغلب می توان ساختار نوار

رسانش را توجیه کرد. البته وضعیت هایی وجود دارد که این مدل در مورد آنها صادق نیست.

بخصوص هنگامی که پتانسیل واقعی بلور منظور شود طیف انرژی تغییر خواهد کرد. (شکل ۱۲-۱-ب)



شکل ۱۲-۱ الف- منحنی های پاشندگی در مدل الکترون آزاد در منطقه تحول یافته

ب- همان منحنی ها در منطقه گسترش یافته [۴]

اولین و دومین نوار که قبلاً در نقطه A و A' در شکل ۱۲-۱ الف تماس داشتند، حال شکافته می شوند بطوری که یک گاف انرژی در مرز منطقه بریلوئن ایجاد می شود. یک گاف مشابه در مرکز منطقه، جایی که قبلاً نوارهای ۲ و ۳ همدیگر را قطع کرده بودند (نقطه B در شکل ۱۲-۱ الف) همچنین در نقطه C که محل تلاقی نوارهای ۳ و ۴ بود، ایجاد می شود. پس در حالت کلی گاف های انرژی در فضای k جایی ایجاد می شوند، که نوارها یکدیگر را قطع می کنند. در این نقاط شکل طیف شدیداً با پتانسیل بلور^(۱) تغییر می کند.

در باقی مانده منطقه، شکل طیف چندان از پتانسیل بلور تأثیر نمی پذیرد، زیرا فرض این است که این پتانسیل ضعیف است. در این ناحیه از فضای k نوارهایی که اساساً شکل هذلولی دارند حفظ می شوند و الکترون در آنجا اساساً مثل یک الکترون آزاد عمل می کند.

حتی یک پتانسیل ضعیف منجر به ایجاد گاف های انرژی می شود . البته باید توجه کرد که به جز در مرزهای منطقه که گاف ها ایجاد می شوند ، منحنی های پاشندگی اساساً همان منحنی های الکترون آزاد هستند . این مطلب را می توان با کمک اصل اغتشاش^(۱) در نظریه

مکانیک کوانتومی اثبات کرد . اولین گاف انرژی با رابطه $E_g = 2 \left| V_{-\frac{\pi}{a}} \right|$ که در آن

$E_g = \left| V_{-\frac{\pi}{a}} \right|$ مولفه فوریه پتانسیل است تعیین می شود ، یعنی گاف های انرژی دو برابر

مولفه فوریه پتانسیل بلوری است . در نتیجه نوار اول به اندازه $E_g = \left| V_{-\frac{\pi}{a}} \right|$ پایین می آید و

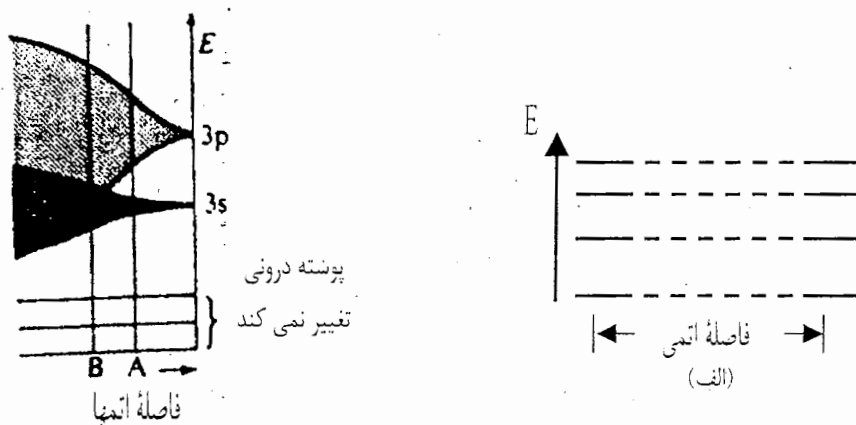
نوار دوم ، به همان اندازه افزایش پیدا می کند و این منجر به یک گاف انرژی می شود که در رابطه بالا بیان دیده می شود .

ب- تقریب بستگی قوی^(۱)

برای بررسی ساختار نواری جامدات بلورین روش های کاملاً متفاوتی با آنچه قبلاً ذکر شد وجود دارد ، که با کمک آنها در خصوص تشکیل نوارها به بینش عمیقتری می توان دست یافت . در روش بستگی قوی فرض می شود که بلور با نزدیک کردن اتمهای منفرد به یکدیگر تشکیل می شود . در این مدل ، پتانسیل بلور بسیار قوی فرض می شود . از این فرض نتیجه می شود که وقتی یک الکترون در طول حرکتش درون شبکه توسط یک یون به دام می افتد ، قبل از آنکه به یون دیگری تونل بزند ، مدت زیادی در اطراف آن یون منفرد دور می زند . یعنی تابع حالت آن اساساً مربوط به یک اوربیتال اتمی است و از اتم های دیگر تأثیرپذیر نخواهد بود .

1-Perturbation Principle
2-Tight Binding approximation

وقتی اتمها کاملاً جدا از هم باشند هر کدام یک سیستم منزوی تشکیل می دهند و در نتیجه ، ترازهای انرژی هم ارز آنها دقیقاً یکسان خواهند بود . اما موقعی که اتمها را آنقدر به هم نزدیک کنیم که بین هر اتم و اتم مجاورش بر هم کنش ایجاد شود ، آنها را باید به صورت یک تک سیستم در نظر گرفت . در این شرایط حالت‌های انرژی هم ارز اولیه ، باید طوری نسبت به یکدیگر انتقال یابند که اصل طرد پائولی نقض نشود . هر چه اتمها به یکدیگر نزدیکتر شوند ، این انتقال بزرگتر خواهد بود و بدیهی است که مقدار آن برای اوربیتالهای الکترونیهای مدارات خارجی چشمگیرتر است . اگر N_1 اتم در اختیار داشته باشیم ، هر حالت الکترونی در یک اتم به N_1 تراز گسترش می یابد . این موضوع در شکل ۱۳-۱ - ب نشان داده شده است . به این ترتیب تراز بیرونی $3S$ سدیم که می تواند دو الکترون را در خود جای دهد ، به نوار حاوی $N_1 \times 2$ تراز گسترته گسترش می یابد . در بالای این تراز حالت‌های $3P$ (که در سدیم اشغال نشده اند) نیز پهن می شوند و نوار دیگری را تشکیل می دهد . پهنای نوارها و گاف های انرژی بین آنها به حالت‌های الکترونی خاص اتم ها و همچنین به فاصله اتمی بستگی دارد .



شکل ۱۳-۱ - رویهم افتادگی ترازهای انرژی به فواصل اتمها وابسته است

الف- هنگامی که اتمها کاملاً از هم دورند و ترازهایشان تیز است .

ب- نحوه تشکیل نوارهای انرژی گاف های انرژی و نوارهای هم پوشان^(۱) را بیان می کند . [۴]

این روش تقریب بستگی قوی نامیده می شود ، زیرا فرض شده است که الکترونهاى خارجی در ابتدا ، بسیار وابسته به اتمهای خود هستند . با کمک این روش می توان نشان می دهد که :

الف- گافهای نواری و نیز همپوشانی نوارها تا حد زیادی به بلور مورد مطالعه بستگی دارد .

ب- چون نوارها از گسترش ترازهای الکترونی مختلف حاصل می شوند ، نه شکل نوار بالایی لزوماً با نوار پایینی یکسان است و نه لازم است که تعداد حالتهاى مجاز در آنها یکسان باشد .

چنین نتایجى بخصوص در محاسبات نوارهای انرژی مواد نیمرسانا اهمیت خاص دارد . هیچ کدام از نتایج ۱ یا ۲ را نمی توان از نظریه نواری الکترونهاى تقریباً آزاد استنتاج کرد .

ج- روش شبه پتانسیل^(۱)

در قسمتهای قبلی روشهایی برای محاسبه نوارهای انرژی بیان شد . این روشها یعنی روش الکترون تقریباً آزاد و روش بستگی قوی ، ساده تر از آن هستند که برای نوارهای واقعی مفید باشند و بتوان آنها را با نتایج تجربی مقایسه کرد .

در اینجا یک روش کلی را که برای محاسبه نوارهای انرژی بکار می رود مورد بحث قرار می دهیم . در این روش (شبه پتانسیل) به دنبال تابعی هستیم که در داخل مغز یونی نوساناتی سریع داشته باشد و در باقیمانده فضای ویگنر سایتز^(۲) مانند یک موج تخت حرکت کند . تابع موج برای بردار موج k را بصورت زیر در نظر می گیریم .

$$\omega_k = Q_k - \sum_i a_i U_i \quad 1-7$$

که در آن Q_k یک موج تحت و U_i یک تابع اتمی است . جمع روی i یعنی بر روی همه حالتهاى اتمی اشغال شده گسترش می یابد .

تابع ω_k همان ترکیبی را دارد که به دنبال آن بودیم. توابع اتمی U_i در خارج از مغز یونی قابل چشم پوشی است و بنابراین $\omega_k \equiv Q_k$ یک موج تخت است. در مغز یونی، پتانسیل اتمی قابل ملاحظه و به گونه ای عمل می کنند که مانند آنچه در شکل ۱۴-۱ نشان داده شده، نوسانات آرامی داشته باشد. حال اگر ω_k را در معادله شرودینگر جایگزین نمائیم، خواهیم داشت:

$$\left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + V\right) \omega_k = E(k) \omega_k \quad ۸-۱$$

با مرتب کردن جملات در می یابیم که معادله را می توان به شکل زیر نوشت:

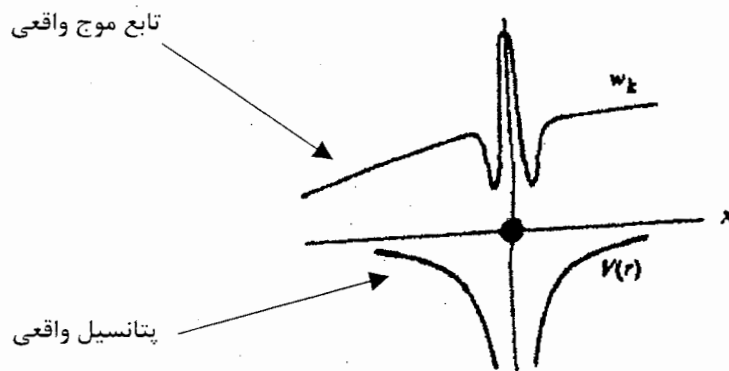
$$\left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + V'\right) Q_k = E(k) Q_k \quad ۹-۱$$

که در آن

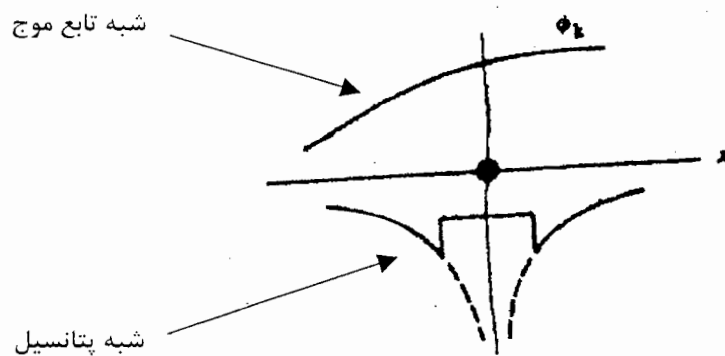
$$V' = V - \sum_i b_i \langle U_i | V | U_i \rangle \quad ۱۰-۱$$

معادله ۹-۱ نشان می دهد که پتانسیل موثر با V بیان می شود، در حالیکه رابطه ۱۰-۱ جمله دوم تمایل به حذف جمله اول دارد. این حذف پتانسیل بلور توسط توابع اتمی معمولاً قابل ملاحظه و اغلب منجر به پتانسیل خیلی ضعیف V' می شود. این پتانسیل، شبه پتانسیل نامیده می شود. از آنجا که V' بسیار ضعیف است تابع موج تقریباً موج تخت است که شبه تابع نامیده می شود. تابع موج و پتانسیل واقعی در شکل ۱۴-۱ و شبه تابع و شبه پتانسیل در شکل ۱۵-۱ نشان داده شده است. چنانکه ملاحظه می شود پتانسیل در نواحی مغز های یونی کاملاً ضعیف است بطوریکه تابع موج در این ناحیه شبیه یک تابع موج تخت هموار رفتار می

کند. روشهای دیگری نیز برای محاسبه نوارهای انرژی وجود دارد که از جمله آنها روش سلولی و روش موج تخت گسترش یافته است.



شکل ۱۴-۱ - یک نمودار شماتیک از پتانسیل واقعی و تابع موج واقعی که در نزدیک یون به سرعت نوسان می کند. (در حالی که پتانسیل واقعی قوی می باشد) [۳]



شکل ۱۵-۱ - نمودار شماتیک از تابع شبه موج در حالی که تابع شبه موج تغییر سریعی ندارد و نمودار

شبه پتانسیل در حالی که شبه پتانسیل در همه جا ضعیف باقی می ماند. (در فاصله دور از یون پتانسیل های

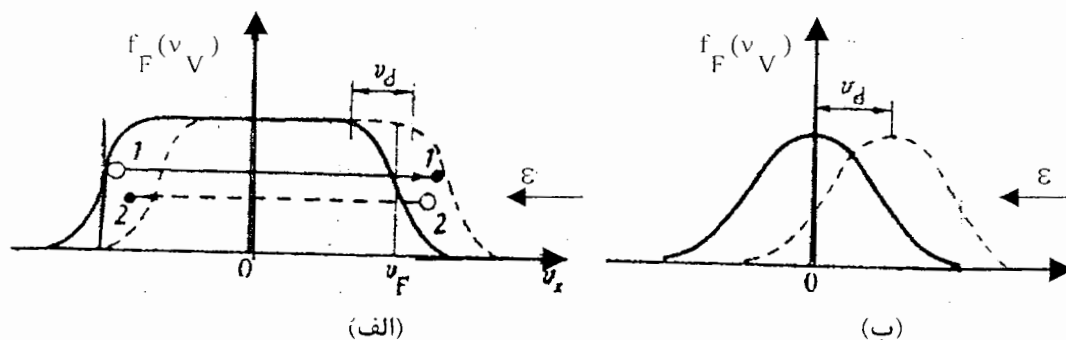
واقعی و شبه پتانسیل و تابع موج واقعی و تابع شبه موج یکسان می باشند) [۳]

فصل دوم

حرکت الکترون درون نیمرسانا
و مکانیسم های پراکندگی الکترون

۲-۱ - نظریه مقدماتی رسانندگی

در غیاب میدان الکتریکی، گاز الکترونی در یک رسانا در حال تعادل بوده و توسط توابع توزیع قابل بررسی است. در مورد یک گاز الکترونی تبیگن تابع مربوطه، تابع توزیع فرمی - دیراک^(۱) است (شکل ۲-۱ - الف)، در صورتی که گاز غیر تبیگن از تابع توزیع ماکسول - بولتزمن^(۲) پیروی می‌کند (شکل ۲-۱ - ب). وقتی ماده رسانا خارج از میدان الکتریکی قرار دارد، الکترونهای آن در بین تمام حالت‌های انرژی تا تراز بالاترین حالت توزیع می‌شوند و در نتیجه به همان تعداد حالت اشغال شده دارای بردار موج مثبت، حالت‌های با بردار موج منفی نیز وجود دارد. یعنی الکترون‌ها به همان تعداد که در یک جهت حرکت می‌کنند، در جهت مخالف نیز حرکت می‌نمایند. اگر سرعت تمام الکترون‌ها را با هم جمع کنیم، میانگین سرعت آنها صفر شده و در نتیجه جریان خالص الکتریکی وجود ندارد.



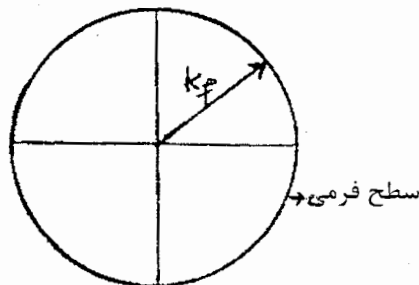
شکل ۲-۱ - الف - منحنی تابع توزیع فرمی-دیراک - ب - منحنی تابع توزیع ماکسول - بولتزمن [۵]

این موضوع در شکل ۲-۲ نشان داده شده است. در این شکل توزیع همسانگرد از بردارهای موج تا مقادیر ماکزیمم نشان داده شده است. این مقادیر بر روی سطح کره ای به نام کره فرمی

1-Fermi - Dirac distribution function

2-Maxwell - Boltzmann distribution function

قرار می گیرند. این سطح، معرف سطحی با انرژی ثابت، مربوط به انرژی فرمی $E_f^{(1)}$ در فضای k است.



شکل ۲-۲ - کره فرمی

هنگامی که میدان الکتریکی E به رسانا اعمال می شود، به هر الکترون نیروی $-eE$ وارد می آید. الکترون در جهت نیروی وارده شتاب می گیرد. (این جهت در مورد الکترونها خلاف جهت قراردادی است) و در نتیجه جریان الکتریکی ایجاد می شود، که شدت آن طبق قانون اهم σE است که در این رابطه ضریب تناسب σ را رسانایی جسم رسانا می نامند.

تحت چنین شرایطی موازنه توزیع حالت‌های اشغال شده برهم می خورد و تعداد الکترونهایی که به سمت راست حرکت می کنند بیش از آنهایی است که به چپ می روند. یعنی یک شارش خالص بار برقرار خواهد بود. در حقیقت تابع توزیع الکترونها دستخوش تغییر شده است. اینگونه حرکت الکترونها را حرکت سوق و سرعت آنها را سرعت سوق^(۲) می نامند. لیکن حرکت الکترونها همیشه نمی تواند به این صورت باشد، زیرا اگر میدان برقرار بماند، شتاب گرفتن الکترونها ادامه می یابد و در نتیجه جریان بطور نامحدودی افزایش خواهد یافت. اما تجربه نشان داده است که پس از مدت بسیار کوتاهی، جریان ثابتی برقرار می شود، که مقدار آن به میزان شدت میدان اعمالی بستگی دارد. علت پایداری جریان این است که الکترونهای واقع در حالت‌های

نزدیک سطح فرمی با ساز و کارهای مختلفی (که بعداً به آن خواهیم پرداخت) پراکنده می شوند. در واقع وجود نواقص گرناگون شبکه موجب تغییراتی در پتانسیل دوره ای شبکه گشته و همچون مراکز پراکندگی برای امواج الکترونی درآمده و باعث میرایی شار جهت دار الکترونها می گردد .

همانگونه که اعمال میدان الکتریکی خارجی به یک رسانا باعث اعمال نیرو به الکترون شده و آنرا شتاب می دهد ، در نیمرسانا نیز مکانیزم مشابهی رخ می دهد که در اینحالت معادله حرکت الکترون تحت اعمال میدان الکتریکی خارجی بنام معادله بولتزمن^(۱) مشهور بوده که در فصل بعدی به شرح آن می پردازیم . در این قسمت ابتدا خواص عمومی نیمرساناها را مرور خواهیم کرد .

به طور کلی جامدات به سه دسته نارساناها (عایق) ، نیمرسانا (نیمه هادی) و رساناها (هادی) گروه بندی می شوند . شکل ۳-۲ رسانندگی الکتریکی σ و مقاومت ویژه مربوطه

$\rho = \frac{1}{\sigma}$) مربوط به مهمترین مواد در هر سه گروه را نشان می دهد . نارساناها مانند شیشه و

کوارتز همجوشیده دارای رسانندگی خیلی پائین در حدود 10^{-18} تا 10^{-8} s/cm

(S = زیمنس) می باشند ، در صورتیکه رساناها نظیر آلومینیوم و نقره دارای رسانندگی بالا ، بطور

نمونه از 10^6 تا 10^4 s/cm هستند . نیمرساناها جامدات بلورینی هستند که دارای آرایش

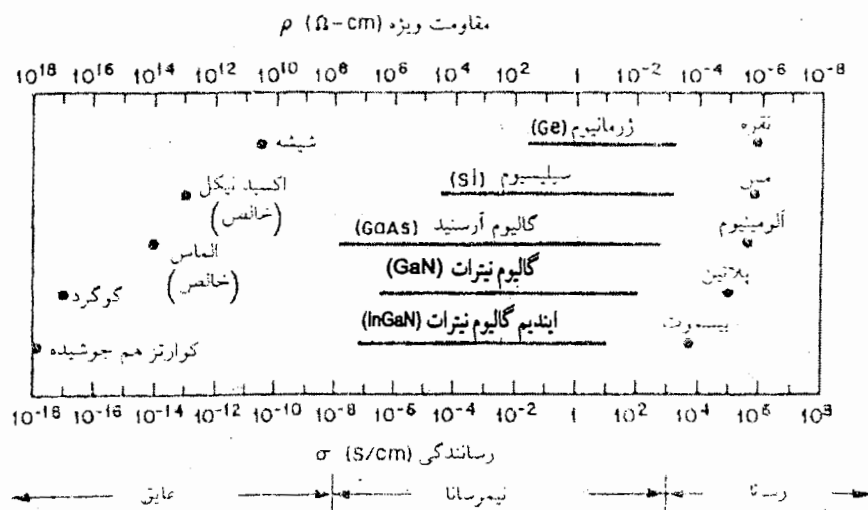
دوره ای و منظم از اتمها هستند . این دسته مواد خواص ویژه و منحصر به فردی دارند ، بطوریکه

امروزه جایگاه ویژه ای ا در صنعت به خود اختصاص داده اند و با پیشرفت فن آوری ، هر روز بر

کاربردهای آنها افزوده می شود .

دیویدهای نوری ، لیزرهای نیمرساناها ، ترانزیستورها و انواع وسایل الکترونیکی و ... نمونه هایی از کاربردهای فراوان نیمرساناها در زندگی امروزه ماست . نیمرساناها دارای رسانندگی بین نارساها و رساناها هستند .

رسانندگی نیمرسانا بطور کلی نسبت به دما ، روشنایی ، میدان مغناطیسی و مقدار دقیق ناخالصی آنها حساسیت دارد . همین حساسیت در رسانندگی است که نیمرساناها را به یکی از مهمترین مواد برای کاربردهای الکترونیکی تبدیل کرده است .



شکل ۳-۲ - برد نوعی رسانندگی برای عایقها - نیمرساناها - رساناها [۶]

مطالعه مواد نیمرسانا در اوایل قرن ۱۹ شروع شد . در طول سالها نیمرساناها فراوانی مورد بررسی قرار گرفته اند . جدول ۱-۲ قسمتی از جدول تناوبی مربوط به مواد نیمرساناها را نشان می دهد .

گروه-II	گروه-III	گروه-IV	گروه-V	گروه-VI
	B	C	N	
Mg	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
Cd	In	Sn	Sb	Te
Hg		Pb		

جدول ۱-۲- قسمتی از جدول تناوبی مربوط به نیمرساناها

نیمرساناهای عنصری یعنی آنهایی که از نمونه های منفرد اتمها تشکیل می شوند ، نظیر سیلیکن Si و ژرمانیوم Ge را می توان در ستون IV پیدا نمود . مع ذالک ، نیمرساناها مرکب را می توان از دو یا چند عنصر تشکیل داد . بطور مثال GaN یک ترکیب نیمرسانا از عناصر گروه III , V جدول تناوبی عناصر است و یا ترکیب نیمرسانای InGaN و یا AlGaN . جدول ۲-۲ بعضی از نیمرساناهای عنصری و مرکب دو یا سه تایی را نشان می دهد .

عنصر	IV - IV	III - V	II - VI	IV - VI
Si	SiC	AlAs	CdS	PbS
Ga		GaAs	CdSe	PbTe
N		GaN	ZnTe	
In		InN	ZnS	
Ge		AlGaN		
		InGaN		

جدول ۲-۲- نیمرساناهای عنصری و مرکب

قبل از اختراع ترانزیستور دو قطبی در ۱۹۴۷ نیمرساناها فقط به عنوان قطعات دو پایانه نظیر صافیها و دیودهای نوری مورد استفاده قرار می گرفتند . در اوایل دهه ۱۹۵۰ ژرمانیوم

مهمترین ماده نیمرسانا بود. مع ذالک، ثابت شد که ژرمانیوم برای بسیاری از کاربردها مناسب نمی باشد، زیرا قطعات ژرمانیوم حتی در دماهای پایین روند نشست جریان بالایی را نشان می دهد. از اوایل دهه ۱۹۶۰ به بعد سیلیکون به یک جانشین عملی تبدیل شده است و واقعاً ژرمانیوم را برای ساخت قطعات نیمرسانا از میدان خارج کرد. در حال حاضر مهمترین نیمرسانا تک عنصری سیلیکون است. دلایل عمده استفاده از سیلیکون، ارزانی تولید، فراوانی آن در طبیعت و نشت جریان عبوری کمتر از این لایه به لایه های زیر است. همچنین اکسید سیلیکون SiO_2 به عنوان عایق گرمایی و الکتریکی استفاده می شود. همچنین نیمرساناها برای کاربردهای موج ریز و خواص نوری نیز مورد استفاده قرار می گیرند.

در مقایسه با نیمرساناهای ترکیبی گروه III - V که مطالعات بسیار فراوانی روی آنها صورت گرفته است نیمرساناهای گروه II - IV کمتر مورد توجه قرار گرفته اند. اخیراً به سبب پیشرفت تکنولوژی ساخت دیودهای گسیل کننده نور با طول موج کوتاه تحقیقات بر روی مواد گروه III - V نظیر GaN، AlN و یا InN بطور وسیعی شروع شده است.

یکی از راههای تغییر در ساختار نواری یک نیمرسانا روش آلیاژ کردن^(۱) می باشد. با روش آلیاژ کردن ساختار نواری قابل تغییر می باشد. در این روش از نیمرساناهای با ساختار بلوری یکسان استفاده می شود. بطور مثال از ترکیب درصد وزنی مشخصی از عنصر In در ترکیب نیمرسانای دوتایی GaN می توان ترکیب سه تایی $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ را بوجود آورده که در آن x درصد وزنی عنصر In است که می تواند بطور مثال ۰/۲، ۰/۴ و ... انتخاب گردد.

ویژگی نیمرساناهای جدید $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ بستگی به درصد وزنی In در ترکیب داشته و وابسته به پارمترهای فیزیکی مواد سازنده آن نظیر GaN , InN دارد که از آنها طبق قانون ویگارد^(۱) ویژگی های ساختاری ترکیبات دوتایی و سه تایی مواد نیمرسانا را می توان برحسب درصد وزنی عناصر تشکیل دهنده آنها بدست آورد .

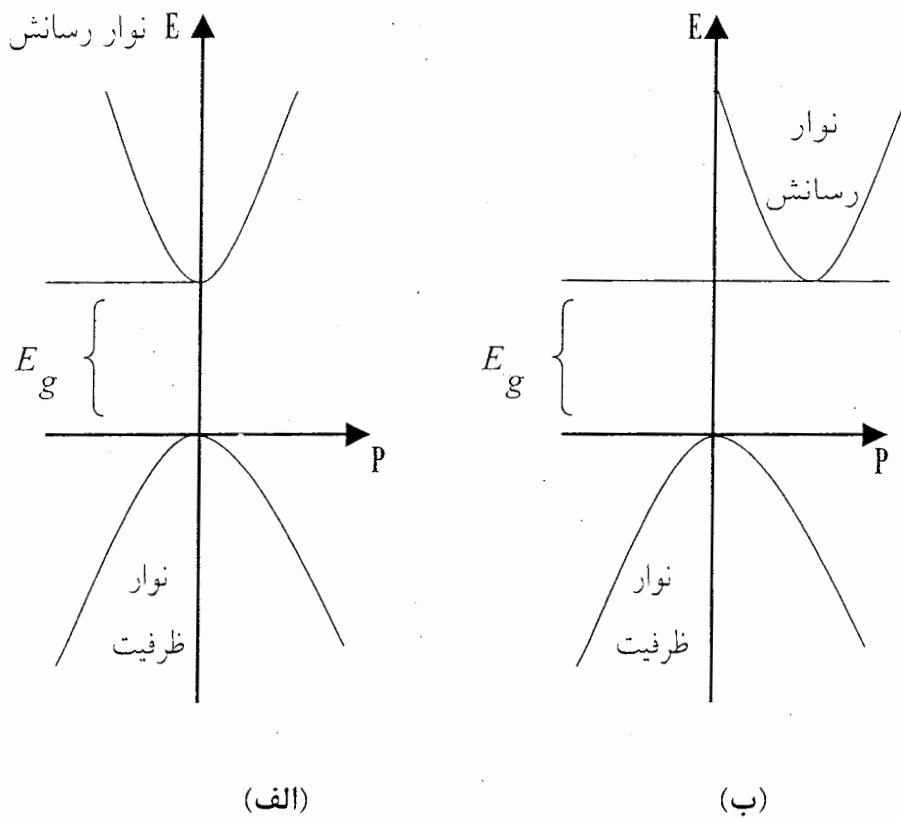
کلیه ویژگی های ساختاری و الکتریکی نیمرساناهای آلیاژی نسبت به ترکیبات سازنده شان تغییر می کند که می توان این ویژگی ها را به کمک قانون ویگارد محاسبه نمود . بطور مثال ثابت شبکه ماده نیمرسانای مرکب $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ را با استفاده از رابطه زیر می توان بدست آورد .

$$a = xa_A + (1-x)a_B \quad 2-1$$

که در آن x درصد وزنی در ترکیب نیمرسانا بوده و a_A , a_B در اینحالت به ترتیب معرف ثابت شبکه های ترکیبات نیمرسانای InN و GaN است . به طور مشابه می توان گاف انرژی ترکیب موردنظر را با استفاده از رابطه مشابه زیر محاسبه کرد :

$$E_g = xE_g^A + (1-x)E_g^B \quad 2-2$$

ضمناً A , B عناصر تشکیل دهنده نیمرسانای مرکب و همانطور که گفته شد x درصد مولی از عناصر ترکیبی است . قابل ذکر است که هر گاه پایین ترین نقطه نوار رسانش منطبق بر بالاترین نقطه نوار ظرفیت باشد ، نیمرسانا مستقیم نامیده می شود در غیر اینصورت نیمرسانا غیرمستقیم است (شکل ۴ - ۲) .



شکل ۴-۲ - نمودار نوار انرژی

الف نیمرسانای مستقیم ، ب نیمرسانای غیرمستقیم

معمولاً بالای نوار ظرفیت را تراز مرجع می گیریم و چنانچه پایین ترین کمینه نوار رسانش مستقیماً در تکانه صفر در بالای بیشینه نوار ظرفیت قرار گرفته باشد نیمرسانا گاف نواری مستقیم نامیده می شود و چنانچه پایین ترین کمینه نوار رسانش در تکانه صفر نباشد نیمرسانا گاف نواری غیرمستقیم نامیده می شود .

شکل ۴-۲ نوار انرژی بر حسب تکانه را نشان می دهد شکل ۴-۲-الف نمودار نوار انرژی یک نیمرسانای مستقیم و شکل ۴-۲-ب نمودار نوار انرژی یک نیمرسانای غیرمستقیم می باشد .

۲-۲- مکانیسم های پراکندگی الکترون^(۱)

برای محاسبه خواص ترابری الکترونی نیمرساناها باید ابتدا مکانیسم های مهم پراکندگی الکترون را شناسایی کنیم. بنابراین، در این بخش به صورت خلاصه فرایندهای پراکندگی الکترون به عنوان مثال در ماده GaN را بررسی کرده و فرمول هایی برای محاسبه میزان پراکندگی به عنوان تابعی از انرژی الکترون ارائه می کنیم. از این روابط در محاسبه خواص ترابری هر ماده نیمرسانای دیگری نظیر InGaN و ... نیز می توان استفاده کرد. بطور کلی آهنگ های پراکندگی محاسبه شده در این فصل در محاسبه تحرک پذیری الکترونی که با حل معادله بولتزمن بدست می آیند استفاده خواهد شد. چنین محاسباتی در فصل چهارم که نتایج حل و بحث معادله بولتزمن در خواص ترابری ماده نیمرسانای $\text{In}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{N}$ است، متذکر خواهد شد.

تعریف کلی:

در یک نیمرسانا، فرایندهای فیزیکی چندی وجود دارند که می توانند باعث پراکندگی الکترون گردند. این فرایندها بستگی به قدرت میدان الکتریکی و خواص ماده مورد نظر دارد. هنگامی که یک الکترون پراکنده می شود بردار موج الکترون از حالت اولیه k به حالت نهایی k' تبدیل می شود. زمان لازم برای این تبدیل را پارامتر برخورد T_c می نامند. فرض ما بر این است که مدت زمان پراکندگی بسیار کوتاه باشد. ($T_c \cong 0$)

برای وارد کردن آهنگ پراکندگی در محاسبات ترابری الکترون عموماً لازم است که فرمول سطح مقطع کلی پراکندگی و وابستگی زاویه ای آن بین حالات k, k' را داشته باشیم. سطح مقطع پراکندگی از حالت k به k' یعنی $s(k, k')$ عموماً بر اساس قاعده طلایی فرمی محاسبه می شود، بطوریکه داریم [۷]:

$$s(k', k) = \frac{2\pi}{\hbar} \int | \langle k' | H | k \rangle |^2 G(k', k) \delta[E(k') - E(k) \pm \Delta E] d^3 k' \quad 2-3$$

که در اینجا $| \langle k' | H | k \rangle |$ عنصر ماتریسی بین توابع موج قبل و بعد از پراکندگی است ، ΔE افزایش (+) یا کاهش (-) انرژی در طی ترابری الکترون بوده و انتگرال گیری روی تمام حالات نهایی انجام می شود که به وسیله تابع دلتای دیراک^(۱) انجام پذیر است .

$G(k, k')$ انتگرال همپوشانی^(۲) بین قسمت های پربودی توابع تناوبی بلوخ حالت های ابتدایی و انتهایی است . برای توابع موج حالت خالص (نوارهای رسانش) ، انتگرال همپوشانی دقیقاً برابر با واحد است . وقتی غیر سهموی بودن نوارها را در نظر داشته باشیم انتگرال همپوشانی همیشه کمتر از یک است و معمولاً به صورت تابعی از ضرایب غیر صفر بیان می شود . در این حالت انتگرال همپوشانی به فرم کلی زیر تعریف می شود :

$$G(k, k') = \frac{1}{V} \sum_{\mu\mu'} \int | u_{\mu\mu'}^*(r) u_{\mu\mu'}(r) |^2 d^3 r \quad 2-4$$

که در آن u تابع موج بین دو حالت نوارهای انرژی است در این حالت طبق نظریه کین^(۳) انتگرال همپوشانی بصورت زیر ساده می شود [۷]:

$$G(k, k') = (a_k a_{k'} + c_k c_{k'} \cos \phi)^2 \quad 2-5$$

که در آن ، ϕ زاویه بین بردارهای k, k' است ، کمیت های a_k, c_k توسط کین به صورت زیر محاسبه شده اند :

1-Dirac delta function
2-Overlap integral
3-Kin

$$a_k = \left[\frac{1 + \alpha E(k)}{1 + 2\alpha E(k)} \right]^{1/2}, \quad c_k = \left[\frac{\alpha E(k)}{1 + 2\alpha E(k)} \right]^{1/2} \quad 2-6$$

بنابراین انتگرال همپوشانی عبارت است از :

$$G(k, k') = \frac{\left[[1 + \alpha E(k)]^{1/2} [1 + \alpha E'(k)]^{1/2} + \alpha (EE')^{1/2} \cos \phi \right]^2}{(1 + 2\alpha E)(1 + 2\alpha E')} \quad 2-7$$

که در اینجا $E' = E(k')$ انرژی الکترون در حالت k' است. وقتی انتگرال همپوشانی معلوم شد می توان آهنگ کلی پراکندگی $R(k)$ را با انتگرال گیری از سطح مقطع پراکندگی $s(k, k')$ در معادله ۲-۳ روی تمام حالات نهایی مجاز به دست آورد، بطوریکه داریم:

$$R(k) = \frac{V}{8\pi^3} \int_0^\infty \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_0^\pi s(k', k) k'^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, dk' \quad 2-8$$

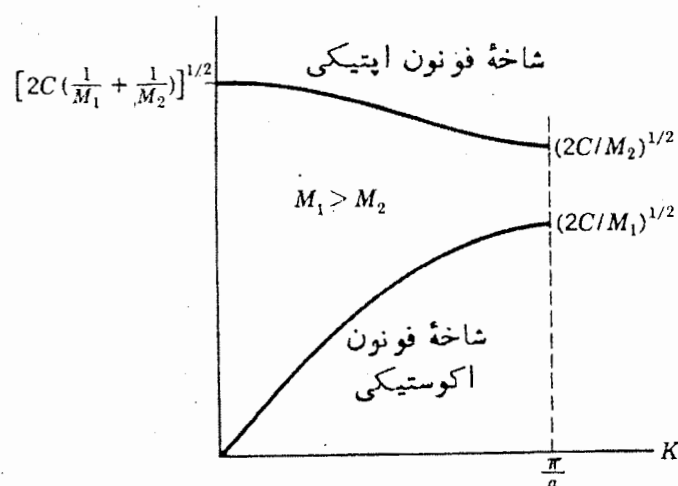
که در اینجا V حجم بلور است.

مکانیسم های پراکندگی را می توان به دو نوع اصلی طبقه بندی کرد. آنهایی که ناشی از ارتعاشات شبکه هستند و پراکندگی از شبکه یا از فونون^(۱) نامیده می شوند، و پراکندگی از نواقص بلوری مانند حضور ناخالصی ها. در زیر رفتار آهنگ پراکندگی را به عنوان تابعی از انرژی بررسی خواهیم نمود.

۲-۳- پراکندگی الکترونی ناشی از ارتعاشات شبکه

پراکندگی از شبکه بر اثر ارتعاش اتم های تشکیل دهنده بلور در اطراف محل های تعادلی آنها رخ می دهد. این ارتعاشات پتانسیل تناوبی وابسته به زمان در نیمرسانا را تغییر می دهد که

نتیجه آن پراکندگی الکترون است. ارتعاشات شبکه را می‌توان کوانتیزه در نظر گرفت و فرآیندهای پراکندگی شبکه را می‌توان به عنوان برهمکنش الکترون‌ها با کوانتوم ارتعاشات شبکه که فونون نامیده می‌شود در نظر گرفت. انرژی فونون‌ها $\hbar\omega(q)$ است، که در آن $\omega(q)$ فرکانس ارتعاش بوده و q بردار موج ارتعاشات شبکه است. پراکندگی الکترون‌ها توسط فونون‌ها بستگی به ماهیت فونون‌ها دارد. بطور کلی فونون‌ها به دو گروه تقسیم می‌شوند و هر گروه شامل دو شاخه است (شکل ۵-۲). برای فونون‌های آکوستیکی، فرکانس ارتعاشات شبکه ω تقریباً به صورت خطی نسبت به a در حوالی مرکزی منطقه بریلوئن افزایش می‌یابد و در مرزهای منطقه به حداکثر می‌رسد.



شکل ۵-۲ - شاخه‌های اپتیکی و آکوستیکی رابطه پاشندگی برای یک شبکه خطی دو اتمی.

فرکانس‌های حادی در مرزهای اولین منطقه بریلوئن نشان داده شده‌اند، (ثابت شبکه برابر با a است). [۵]

دو شاخه این گروه متناظر با ارتعاشات طولی (LA) و عرضی (TA) هستند. در مورد فونون‌های اپتیکی، چنانچه از شکل مشاهده می‌شود، فرکانس ارتعاشات شبکه در مرکز مناطق

بریلوئن تقریباً ثابت است ولی در مرز منطقه به مقدار کمتری می رسد. دو شاخه ایسن گروه نیز متناظر با ارتعاشات طولی (Lo) و عرضی (To) هستند.

۱-۳-۲- پراکندگی الکترون در اثر فونون های آکوستیکی^(۱)

ارتعاشات آکوستیک شبکه باعث می شوند که اتم های مجاور در ساختار تناوبی بلور به صورت همفاز ارتعاش کنند. پراکندگی الکترون ها توسط فونون های آکوستیکی به دو طریق زیر اتفاق می افتد.

الف- پراکندگی الکترونها در اثر تغییر شکل شبکه

مدهای مختلف فونون های آکوستیکی فضای بین اتم ها را تغییر می دهند. تغییر در فضای بین اتم ها در شبکه بلوری باعث جابجایی لبه های نوارهای رسانش در ساختار نواری بلور می شود. نتیجه چنین جابجایی هایی در لبه های نوارهای انرژی باعث بوجود آمدن پتانسیل اغتشاش گری بنام پتانسیل تغییر شکل شبکه^(۲) است که بر حرکت الکترون اثر می گذارد و منجر به پراکندگی الکترون ها می شود. محدوده انرژی در پراکندگی به وسیله فونون های آکوستیکی از ۰ تا $2\hbar vk$ است. که در آن v سرعت صوت (چون بقای اندازه حرکت بلوری، تغییر بردار موج فونون را به محدوده ۰ تا $2k$ محدود می کند) و k بردار موج الکترون است. به طور معمول، مقدار متوسط k در محدوده 10^5 v/cm و سرعت صوت در محیط حدود 10^5 cm/s است. بنابراین $2\hbar vk$ تقریباً برابر با ۱ میلی الکترون ولت است که نسبت به انرژی حرارتی در دمای اتاق اندک است. بنابراین، پراکندگی تغییر شکل را می توان یک فرآیند الاستیک دانست.

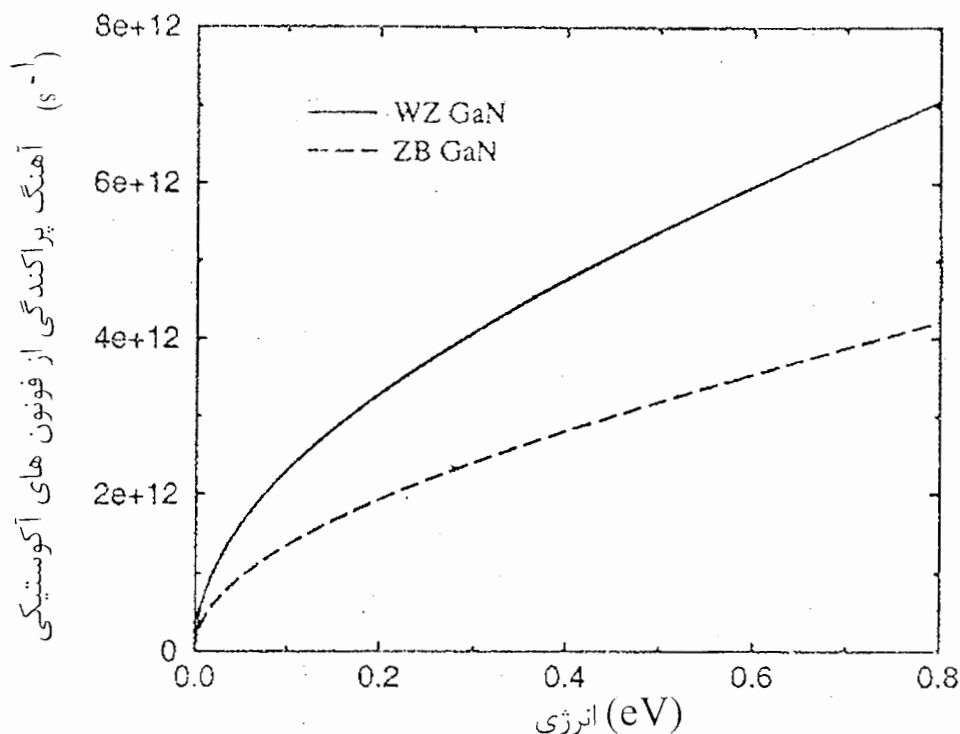
1-Acoustic Phonon

2-Deformation Potential

آهنگ پراکندگی پتانسیل تغییر شکل برای الکترونی با انرژی E در نوار غیر سهموی از قاعده طلایی فرمی بدست می آید ، بطوریکه داریم [۸] :

$$R_{de}(k) = \frac{\sqrt{2} D_{ac}^2 (m_t^* m_I^*)^{1/2} k_B T \sqrt{E(1+\alpha E)}}{\pi \rho v^2 h^2 (1+2\alpha E)} \left[(1+2\alpha E)^2 + 1/2 (\alpha E)^2 \right] \quad 2-9$$

که در اینجا D_{ac} پتانسیل تغییر شکل آکوستیکی ، ρ چگالی ماده و α ضریب انحراف نوارهای انرژی از سهموی بودن^(۱) است . رابطه فوق نشان می دهد که این پراکندگی با دما افزایش می یابد .



شکل ۲-۶ - آهنگ پراکندگی فونون های آکوستیکی بر حسب انرژی در دره Γ برای

الکترونهای GaN در ساختارهای زینک بلند و وورتسایت در دمای اتاق [۸]

آهنگ پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه در هر دو نوع ساختار زینک بلند و وورتسایت GaN در شکل ۶-۲ نشان داده شده است .

چنانکه از رابطه ۹-۲ ملاحظه می شود ، وابستگی آهنگ پراکندگی به انرژی به صورت $E^{3/2}$ است . روشن است که در وورتسایت ، آهنگ پراکندگی بالاتر از ساختار زینک بلند است که ناشی از پایین بودن سرعت صوت و بالاتر بودن جرم موثر الکترون در دره Γ است . همانند سایر مواد III - V این پراکندگی در دماهای بالا مهم ترین مکانیسم پراکندگی است .

ب- پراکندگی الکترونها در اثر پیزوالکتریک^(۱)

نوع دوم پراکندگی الکترون زمانی روی می دهد که جابجایی اتم ها از طریق اثر پیزوالکتریک یک میدان الکتریکی ایجاد نماید . این مسئله در نیمرساناهای مرکب III-V و II-VI از جمله GaN , InN , InGaN که دارای عدم تقارن بالایی در ساختار بلوری می باشند ، ملاحظه می شود . پراکندگی ناشی از فرآیند پیزو الکتریک ابتدا توسط ریدلی^(۲) بررسی شد . وی پراکندگی الکترون تحت اثر خواص پیزوالکتریسته بلور را بخاطر انرژی پایین الکترونها الاستیک در نظر گرفته و آهنگ پراکندگی کل الکترونها را می توان با رابطه کلی زیر محاسبه نمود [۹] :

$$R_{PZ}(k) = \int (1 - \cos \theta) S_{el}(k, k') d^3 k' \quad 2-10$$

که در آن $S_{el}(k, k')$ سطح مقطع پراکندگی الکترونها تحت تأثیر پتانسیل موثر اغتشاش است که بصورت زیر در نظر گرفته می شود :

$$S_{el}(k, k') = \frac{e^2 k_B T P^2}{4\pi\hbar^2 \epsilon_0} \frac{G(k, k')}{|k - k'|^2} \delta[E(k) - E(k')] \quad 2-11$$

در این رابطه P ضریب پیزوالکتریک ماده موردنظر است. با جایگذاری رابطه ۲-۱۱ در ۲-۱۰ آهنگ پراکندگی الکترونها در اثر خواص پیزوالکتریک ماده قابل محاسبه است بطوریکه داریم:

$$R_{PZ}(k) = \frac{e^2 k_B T P^2}{4\pi\hbar^2 t} \int (1 - \cos\theta) \frac{G(k, k')}{|k, k'|^2} [E(k) - E(k')] d^3 k' \quad 2-12$$

که در آن $d^3 k'$ المان حجم در سیستم مختصات کروی است بطوریکه می توان نوشت:

$$d^3 k' = k'^2 dk' d(\cos\theta') d\phi \quad 2-13$$

برای محاسبه انتگرال ۲-۱۲ بر حسب بردار موج k' کافی است از خواص تابع دلتای دیراک

استفاده کنیم. چنانچه می دانیم می توان نوشت:

$$\delta[E(k) - E(k')] = \frac{\delta(k - k')}{\left| \frac{\partial E(k')}{\partial k'} \right|} \quad 2-14$$

که در آن برای نوارهای انرژی همواره داریم:

$$\frac{\partial E(k')}{\partial k'} = \frac{\hbar^2 k'}{m^* (1 + \alpha E')} \quad 2-15$$

بنابراین با در نظر گرفتن انتگرال همپوشانی $G(k, k')$ از معادله ۲-۷ و جایگذاری روابط

۲-۱۳ و ۲-۱۴ و ۲-۱۵ در رابطه ۲-۱۲ و نهایتاً انتگرالگیری از آن، آهنگ پراکندگی الکترونها در

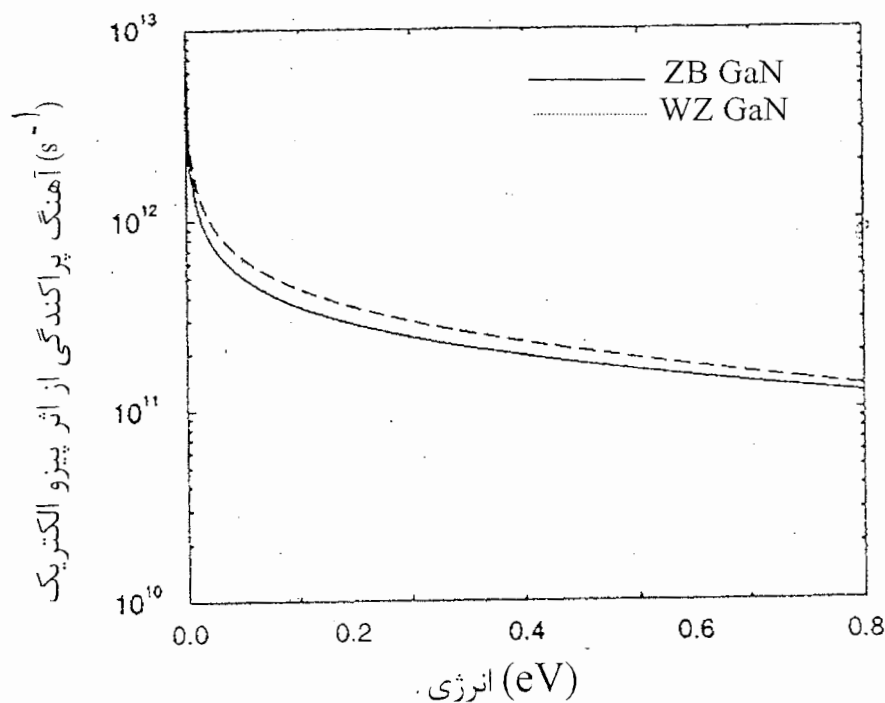
پراکندگی پیزوالکتریک برابر می شود با $[A]$:

$$R_{pz}(k) = \frac{\sqrt{m^*} e^{\gamma} (k_{av}^{\gamma} k_B T)^{-\frac{1}{\gamma}}}{4\sqrt{\gamma} \pi \hbar^{\gamma} \epsilon_o \epsilon_s} \gamma^{-\frac{1}{\gamma}} (E)(1 + \gamma \alpha E)^{\gamma} \times$$

$$\left\{ \ln\left(1 + \frac{\lambda m^* \gamma(E)}{\hbar^{\gamma} q_o^{\gamma}}\right) - \frac{1}{1 + \hbar^{\gamma} q_o^{\gamma} / \lambda m^* \gamma(E)} + \left(\frac{\sqrt{\gamma} \alpha E}{1 + \gamma \alpha E}\right)^{\gamma} \right\} \quad 2-16$$

که در اینجا k_{av} یک ثابت بدون بعد است.

آهنگ پراکندگی ناشی از فرآیند پیزو الکتریک در دو نوع ساختار زینک بلند و وورتسایت GaN در شکل ۲-۷ نشان داده شده است.



شکل ۲-۷ - آهنگ پراکندگی پیزو الکتریک بر حسب انرژی در دره Γ برای الکترونهای GaN در دو

ساختار زینک بلند و وورتسایت در دمای اتاق [۸]

اگر ثابت پیزو الکترونیک هر دو نوع ساختار بلوری را 0.375 Cm^{-2} در نظر بگیریم، بالاتر بودن آهنگ پراکندگی در ساختار بلوری وورتسایت به علت بالاتر بودن جرم موثر الکترون در این ساختار است.

۲-۳-۲- پراکندگی الکترونها در اثر فونون های اپتیکی^(۱)

ارتعاشات اپتیکی شبکه باعث می شود اتمهای مجاور در شبکه در فاز مخالف هم به ارتعاش در آیند. بنابراین جابجایی اتمها شبکه در فاز مخالف هم باعث جدایی یون های مثبت و منفی شبکه در دو سوی بلور می گردد. نتیجه چنین جابه جایی بار در شبکه باعث بوجود آمدن اثرات دو قطبی در ساختار بلورین است. لذا عموماً پراکندگی ناشی از فونون اپتیکی را، پراکندگی الکترونها در اثر اندرکنش آنها با پتانسیل دوقطبی ایجاد شده در بلور نیز می نامند که در زیر به شرح آن می پردازیم.

الف- پراکندگی فونون های اپتیکی قطبی^(۲)

میدان الکترونیک دو قطبی حاصل از فونون های اپتیکی باعث اندرکنش بین شبکه و الکترون ها می گردد که نتیجه آن پراکندگی الکترون هاست. این نوع پراکندگی مهم ترین مکانیسم پراکندگی در دمای اتاق در نیمرساناهای گروه III - V مانند GaN و یا ترکیبات دیگر نظیر InGaN است. زیرا در این گروه ترکیبات نیمرسانا انرژی فونون ها بالاست. بطور مثال انرژی فونون های اپتیکی در نیمرسانای GaN که در ساختار وورتسایت متبلور شده باشد در حدود 99 meV است که در مقایسه با دیگر ترکیبات نیمرسانا از گروه های III - V و II - VI بسیار بیشتر است. همچنین در اینگونه ترکیبات فونون های اپتیکی تا قبل از رسیدن به چنین

1-Optical Phonons

2-Polar Optical Phonon interaction

انرژی ای ، هیچگونه گسیلی از خود نشان نمی دهند و تمامی انرژی کسب شده را صرفاً بصورت ارتعاش فونون اپتیکی در شبکه بلور آزاد می کند . با محاسبه ای مشابه آنچه که در پراکندگی فونون های آکوستیکی انجام شد می توان نشان داد که آهنگ پراکندگی از فونون های اپتیکی برای الکترون هایی با انرژی E که در دره مرکزی Γ قرار دارند از رابطه زیر بدست می آید [۸] :

$$R_{po}(k) = \frac{\sqrt{2m^*} e^2 \omega_{op}}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \frac{1 + 2\alpha E'}{\gamma^{\frac{1}{2}}(E)} F_0(E, E') \left\{ \frac{N_{op}}{N_{op} + 1} \right\} \quad 2-17$$

که در آن داریم :

$$F_0(E, E') = C^{-1} \left\{ A \ln \left| \frac{\gamma^{\frac{1}{2}}(E) + \gamma^{\frac{1}{2}}(E')}{\gamma^{\frac{1}{2}}(E) - \gamma^{\frac{1}{2}}(E')} \right| + B \right\}$$

$$A = [2(1 + \alpha E)(1 + \alpha E') + \alpha(\gamma + \gamma')]^{\frac{1}{2}} \quad 2-18$$

$$B = -2\alpha\gamma^{\frac{1}{2}}\gamma'^{\frac{1}{2}} [2(1 + \alpha E)(1 + \alpha E') + \alpha(\gamma + \gamma')]$$

$$C = 4(1 + \alpha E)(1 + \alpha E')(1 + 2\alpha E)(1 + 2\alpha E')$$

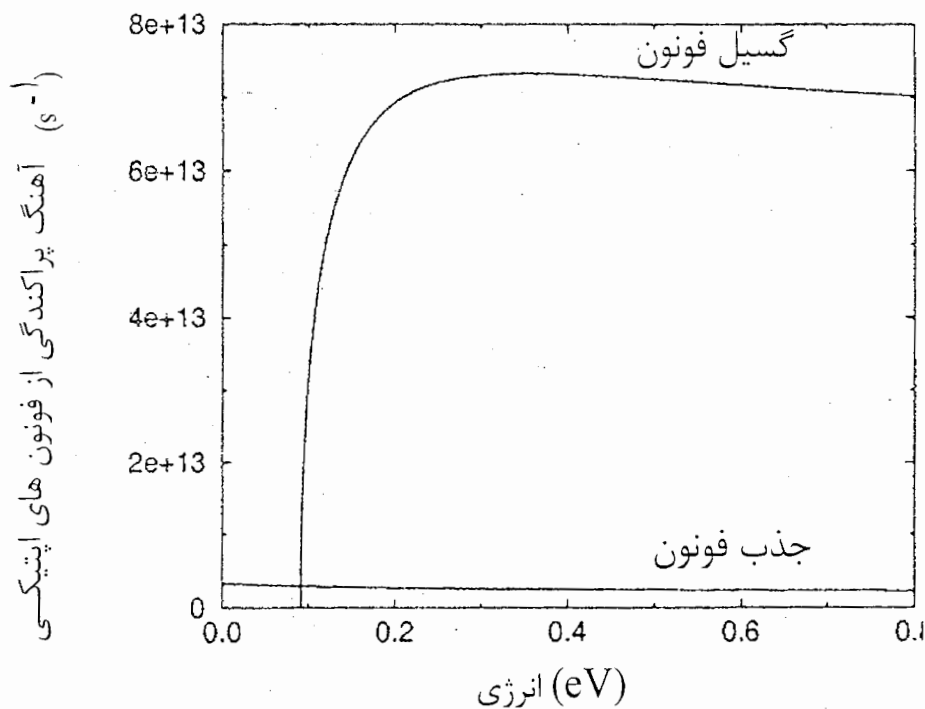
که در آن $\epsilon_\infty, \epsilon_0$ بترتیب ضرایب گذردهی الکتریکی ماده در حد فرکانس های پایین و بالاست . N_{op} عدد اشغال فونون است و مقادیر (+) و (-) به ترتیب معرف حالت های جذب و گسیل فونون است . برای میدان های الکتریکی ضعیف چگالی فونون ها در حد تعادل خواهد بود و تابع توزیع فونون ها با استفاده از تابع توزیع بوز - اینشتین^(۱) محاسبه می شود بطوریکه داریم :

$$N_{op} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{op}}{K_B T}\right) - 1} \quad 2-19$$

که در اینجا ، $\hbar\omega_{op}$ انرژی فونون های اپتیکی قطبی است .

آهنگ پراکندگی از فونون های اپتیکی برای ساختار وورتسایت GaN بعنوان مثال در دو

حالت جذب و گسیل الکترون در شکل ۸-۲ نشان داده شده است .



شکل ۸-۲ - آهنگ پراکندگی فونون های اپتیکی بر حسب انرژی در ذره Γ برای الکترونهای GaN در دو ساختار زینک بلند و وورتسایت در دمای اتاق [۸]

چنانچه ملاحظه می شود ، جذب فونون های اپتیکی در هر سطح انرژی صورت می پذیرد

ولی گسیل فقط زمانی صورت می پذیرد که انرژی اولیه الکترون از انرژی فونون های اپتیکی

(0.0995 eV) بالاتر باشد . در انرژی آستانه ، آهنگ پراکندگی به حد $7 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ می رسد

و بعد به کندی کاهش می یابد . آهنگ جذب فونون های اپتیکی در $2 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ است .

شکل ۸-۲ اهمیت گسیل فونون های اپتیکی در دمای بالا را در خواص ترابری الکترون ها در ساختارهای نیترا دار نظیر GaN ، InN و AlN و یا حتی ترکیبات سه و یا چهارتایی از آنها را نشان می دهد .

۳-۳-۲- پراکندگی از حضور اتم های ناخالصی^(۱)

این نوع پراکندگی در اثر وجود اتم های ناخالصی در نیمرسانا بوجود می آید . جایگزینی یک اتم ناخالصی در یک محل شبکه باعث به هم خوردن نظم پتانسیل تناوبی بلور می گردد . بی نظمی در پتانسیل تناوبی شبکه طبق نظریه اغتشاش در کوانتوم مکانیک ایجاد پتانسیل اغتشاشگر کرده که با محاسبه توابع موج الکترونی در حضور چنین پتانسیلی می توان ویژه حالات انرژی را در این حالت محاسبه کرد .

در هر حال اندرکنش الکترون با چنین پتانسیل اغتشاشگری باعث پراکندگی الکترون خواهد شد . در هر صورت چون عموماً جرم اتم ناخالصی بسیار بیشتر از جرم الکترون است ، لذا پراکندگی از حضور اتم های ناخالصی در بلور ، از نوع الاستیک می باشد .

آهنگ پراکندگی الکترونها از اتم های ناخالصی در دماهای پایین بیشتر از دماهای بالاست . زیرا در دماهای پایین انرژی جنبشی الکترون کم بوده $(\frac{3}{2}k_B T)$ و لذا الکترون زمان بیشتری در حضور اتم ناخالصی خواهد بود و بنابراین اثر پتانسیل کولنی ناشی از آن را بیشتر احساس خواهد کرد . در فصل نتایج به وضوح اثر حضور اتم های ناخالصی را در پراکندگی الکترونها در دو حد دماهای بالا و پایین در محاسبه تحرک پذیری در ماده $_{\text{In}}_{\text{Ga}}_{\text{N}}$ ملاحظه خواهیم کرد . با

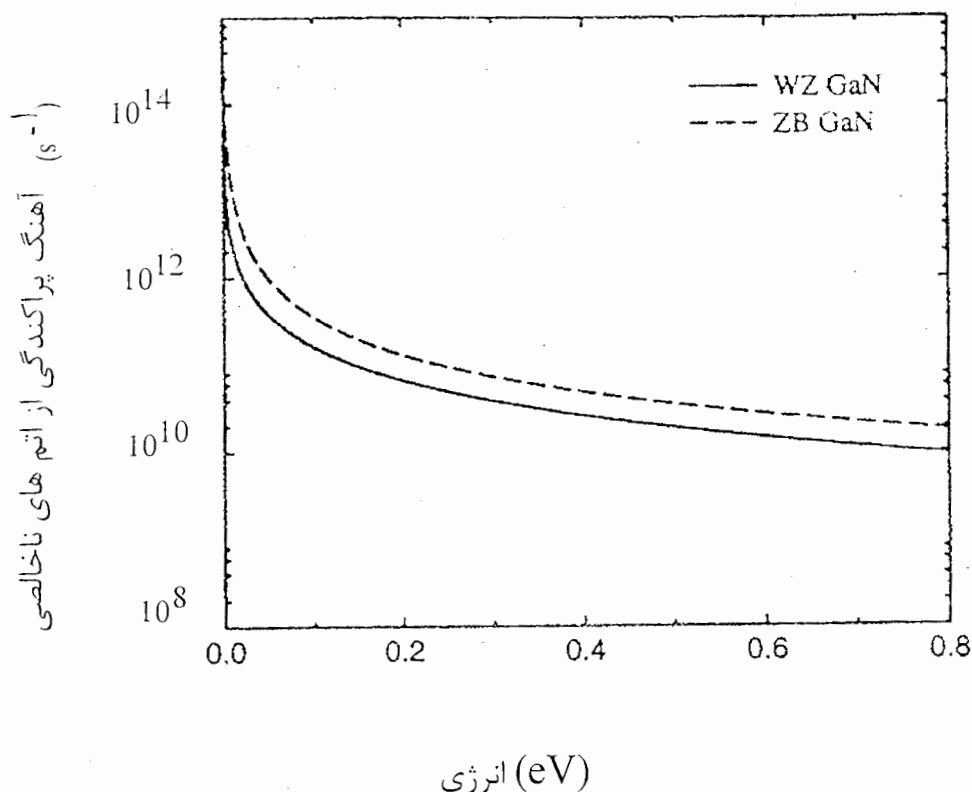
محاسبات مشابهی مطابق آنچه در قسمت های قبلی انجام شد می توان ثابت کرد که آهنگ پراکندگی الکترونها در دره مرکزی Γ ناشی از اتم های ناخالصی از رابطه زیر بدست می آید [۸]:

$$R_{im}(k) = \frac{4\pi n_i e^4}{k_s^2 \hbar q_0} (m_t^* m_l^*)^{\frac{1}{2}} \gamma(E) \frac{1 + 2\alpha F}{1 + 4\sqrt{2}\gamma(E)(m_t^* m_l^*)^{\frac{1}{2}} / \hbar q_0} \quad (2-2)$$

که در آن n_i چگالی اتم های ناخالصی، q_0 ثابت استتار و k_s ثابت دی الکتریک ماده

است. آهنگ پراکندگی از اتم های ناخالصی برای چگالی اتم های ناخالصی از مرتبه $10^{22} m^{-3}$

در شکل ۹-۲ برای دو ساختار زینک بلند و وورتسایت GaN بعنوان مثال نشان داده شده است.



شکل ۹-۲ - آهنگ پراکندگی در اثر حضور اتم های ناخالصی بر حسب انرژی در دره Γ برای

الکترون های GaN در دو ساختار زینک بلند و وورتسایت در دمای اتاق [۸]

چنانچه ملاحظه می شود ، آهنگ پراکندگی الکترونها با افزایش انرژی الکترون کاهش می یابد . بنابراین در حد میدان های الکتریکی شدید و برای الکترون های پرانرژی پراکندگی از اتم های ناخالصی اهمیت چندانی در ترابری حامل ها در جامدات بلورین ندارد .

فصل سوم

معادله ترابری بولتزمن

معادله ترابری بولتزمن

خواص ترابری الکترون ها در نیمرساناهای با گاف انرژی مستقیم را می توان به راحتی با حل مستقیم معادله بولتزمن بدست آورد. از حل معادله بولتزمن می توان خواص ترابری حامل های بار را در هر جامد بلورین که تحت تأثیر میدان الکتریکی خارجی قرار دارد مشخص کرد. از جمله این خواص ترابری حامل ها می توان به محاسبه جریان الکتریکی، تحرک پذیری حامل های نیمرسانا، ضریب هال و مقاومت الکتریکی اشاره نمود.

معادله بولتزمن در حالت کلی بصورت زیر مطرح می شود:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \quad 3-1$$

که در آن $f = f(r, k, t)$ تابع توزیع حامل های بار مانند الکترون ها درون ماده نیمرساناست. با توجه به آنکه الکترون ها فرمیون اند ^(۱) یعنی ذراتی با عدد اسپینی غیر صحیح اند (لذا تابع توزیع الکترون ها در درون ماده نیمرسانا از آمار فرمی - دیراک ^(۲) پیروی کرده که می توان آن را بصورت کلی زیر در نظر گرفت:

$$f = f(r, k, t) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_f}{k_B T}}} \quad 3-2$$

همچنین در معادله ترابری حامل بولتزمن، $\vec{E}$ شدت میدان الکتریکی اعمال شده بر بلور، $\vec{V}$ سرعت حامل های بار در بلور و $\vec{\nabla}_r$ و $\vec{\nabla}_k$ به ترتیب مشتقات تابع توزیع الکترون ها نسبت به مختصات فضای حقیقی ($\vec{r}$) و فضای وارونه بلور ($\vec{k}$) می باشند. در این معادله $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}}$ معرف تغییر در تابع توزیع الکترون ها تحت تأثیر عوامل مختلف پراکندگی است که در فصل قبل به

1-Fermion

2-Fermi - Dirac distribution function

آنها بطور اجمال اشاره گردید. به منظور سادگی حل و بحث معادله بولتزمن انتخاب شرایط اولیه اعمال شده بر بلور ضروری است. بدین منظور در این پژوهش شرایط را طوری در نظر می گیریم که اولاً، میدان الکتریکی خارجی اعمال شده بر بلور نیمرسانا یکنواخت بوده و مستقل از زمان باشد و همچنین ترابری الکترونها را در ماده نیمرسانا در حالت پایا بررسی می کنیم. این بدان معناست که تابع توزیع الکترونها در بلور به مختصه مکانی بلور وابسته نیست. تحت چنین شرایطی می توان معادله بولتزمن را به ساده ترین شکل ممکنه در نظر گرفت، بطوریکه خواهیم داشت:

$$\frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \quad 3-3$$

در محاسبه تغییر در تابع توزیع الکترونها تحت تأثیر عوامل مختلف پراکندگی باید هر دو حالت گسیل و جذب الکترونها را بین حالات انرژی بالا و پایین در نظر گرفت. زیرا چنانکه می دانیم تحت تأثیر عوامل مختلف پراکندگی، الکترون ممکن است انرژی جذب نموده و از حالت اولیه k به حالت نهایی k' برانگیخته شود. تحت چنین شرایطی قطعاً تابع توزیع الکترونها پس از جذب انرژی تغییر خواهد کرد. البته باید در نظر داشت که در گذار الکترون از یک حالت انرژی به حالت انرژی بالاتر یا پایین تر، اصل طرد پائولی باید برقرار بماند. این بدان معنی است که در برانگیختگی الکترون از حالت اولیه k با تابع توزیع $f_0(k)$ به حالت برانگیخته k' که در آن تابع توزیع الکترونها $f(k')$ فرض می شود، وجود یک تراز انرژی خالی برای راه یافتن الکترون به آن تراز ضروری است. بنابراین در این حالت احتمال پراکندگی الکترونها از یک تراز k به k' با ضریب $f_0(k)[1 - f(k')]$ قابل بررسی است که در آن $1 - f(k')$ ، احتمال خالی بودن یک تراز

انرژی در سطح انرژی بالاتر k' است. چنین ضربی را نیز در پراکندگی الکترون‌ها از سطح تراز انرژی بالاتر k' به تراز انرژی پایین تر k باید در نظر گرفت، $f(k')[1 - f_0(k)]$.

در محاسبه خواص ترابری الکترون‌ها در مواد نیم‌رسانا عموماً مهم‌ترین عوامل پراکندگی شامل پراکندگی غیرالاستیکی از فونون‌های اپتیکی است که پراکندگی از آنها را با رابطه $S_{inel}(k, k')$ نمایش می‌دهیم و پراکندگی الاستیکی نظیر پراکندگی از فونون‌های آکوستیکی، پراکندگی پیزوالکتریک و پراکندگی ناشی از حضور اتم‌ها ناخالصی است. پراکندگی از چنین فرآیندهای الاستیکی را با نماد $S_{el}(k, k')$ نمایش می‌دهیم. لذا در حالت کلی آهنگ پراکندگی کل الکترون‌ها در ماده نیم‌رسانا مجموع ایندو پراکندگی بوده بطوریکه می‌توان نوشت [۹]:

$$S(k, k') = S_{el}(k, k') + S_{inel}(k, k') \quad ۳-۴$$

به منظور حل و بحث معادله بولتزمن تحت شرایط حالت پایا (معادله ۳-۳)، فرض می‌کنیم الکترون‌ها در غیاب هر گونه میدان الکتریکی خارجی در پایین‌ترین دره نوار رسانش (دره Γ) با تابع توزیع $f_0(k)$ حضور داشته باشند. با اعمال میدان الکتریکی خارجی تابع توزیع الکترون‌ها از حالت تعادل خارج شده و می‌توان آن را طبق نظریه اغتشاش در مکانیک کوانتومی بررسی نمود. بدین منظور اگر میدان الکتریکی خارجی اعمالی به بلور نیم‌رسانا به حد کافی ضعیف باشد ($E < 10^5 \text{ N/m}$)، تغییر در تابع توزیع الکترون‌ها را تا تقریب مرتبه اول می‌توان بصورت زیر در نظر گرفت:

$$f(k) = f_0(k) + g(k)\cos\theta \quad ۳-۵$$

که در آن θ زاویه بین بردارهای میدان الکتریکی اعمالی $\vec{E}$ و بردار موج الکترون $\vec{k}$ است. $g(k)$ تغییر جزئی در تابع توزیع الکترون‌هاست که خود وابسته به اندازه شدت میدان

الکتریکی اعمالی است. با جایگذاری تابع توزیع الکترون‌ها در اینحالت در معادلهٔ بولتزمن (معادلهٔ ۳-۳) و با در نظر گرفتن آهنگ پراکندگی کل (معادلهٔ ۴-۳) پس از ساده سازی خواهیم داشت [۹]:

$$\frac{eE \cos \theta}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial k} = \left\{ \int \cos \phi g' [S'_i (1 - f_0) + S_i f_0] d^3 k' \right. \\ \left. - g \cos \phi \int [S_i (1 - f'_0) + S'_i f'_0] d^3 k' \right\} \quad 3-6$$

که در آن جمع بر روی تمامی فرآیندهای پراکندگی موجود در شبکه بلور است. همچنین در رابطهٔ فوق به منظور خلاصه نویسی آهنگ پراکندگی در حالت گسیل و جذب را با روابط $S_i(k, k') = S_i$ و $S_i(k', k) = S'_i$ نشان داده ایم. لازم به یادآوری است که برای نوارهای انرژی متقارن، آهنگ پراکندگی به بردارهای موج حالت اولیه و نهایی (و در نتیجه سطح تراز انرژی حالت های اولیه و نهایی) و زاویهٔ بین ایندو بستگی دارد، بطوریکه می توان در محاسبهٔ انتگرال رابطهٔ ۳-۶ از اتحاد ریاضی زیر استفاده نمود یعنی [۹]:

$$\int \cos \theta' A(\cos \phi) d^3 k' = \cos \theta \int \cos \phi A(\cos \phi) d^3 k' \quad 3-7$$

که در آن $A(\cos \phi)$ تابعی از $\cos \phi$ بوده و بستگی به زوایای θ, θ' ندارد.

بنابراین با استفاده از اتحاد فوق می توان معادلهٔ ۳-۶ را بصورت زیر نیز نوشت [۹]:

$$\frac{eE}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial k} = \left\{ \int \cos \phi g' [S'_i (1 - f_0) + S_i f_0] d^3 k' \right. \\ \left. - g \int [S_i (1 - f'_0) + S'_i f'_0] d^3 k' \right\} \quad 3-8$$

حال همانطور که اشاره کردیم، چون آهنگهای پراکندگی کل الکترون‌ها هنگام گسیل و جذب الکترون S'_i, S_i شامل هر دو نوع پراکندگی الاستیکی و غیرالاستیکی است، چنانچه در

رابطه فوق اثر هر دو نوع پراکندگی را از رابطه ۳-۴ در نظر بگیریم ، $g(k)$ که همان تغییر جزئی در تابع توزیع الکترونها در پی برخوردهای متوالی است از رابطه زیر محاسبه خواهد شد [۹].

$$g(k) = \frac{-eE \frac{\partial f_0}{\partial k} + \int \cos \phi g'(k) [S'_{inel}(1-f_0) + S_{inel}f_0] d^3k'}{\int (1-\cos \phi) S_{el} d^3k' + [S_{inel}(1-f_0) + S'_{inel}f_0] d^3k'} \quad 3-9$$

در رابطه فوق اولین جمله در مخرج ، مجموع آهنگ های پراکندگی الکترون در اثر کلیه پراکندگی های الاستیکی است .

معادله پیچیده فوق را می توان به روش های عددی مختلف حل نمود . بطور مثال چنانچه آن را به روش عددی برگشت پذیر^(۱) حل و بحث کنیم ، معادله بازگشتی اندازه تغییر جزئی تابع توزیع الکترونها در مرتبه n ام بر حسب مرتبه $n-1$ ام از رابطه زیر بدست خواهد آمد :

$$g(k)[n] = \frac{-eE \frac{\partial f_0}{\partial k} \int \cos \phi g'(k)[n-1] [S'_{inel}(1-f_0) + S_{inel}f_0] d^3k'}{\int (1-\cos \phi) S_{el} d^3k' + [S_{inel}(1-f_0) + S'_{inel}f_0] d^3k'} \quad 3-10$$

برای محاسبه معادله بازگشتی فوق کافی است یک برنامه کامپیوتری^(۲) نوشته شود بطوریکه این برنامه مشتمل بر محاسبه کلیه آهنگ های پراکندگی موجود در نمونه بلورین تحت تأثیر میدان های الکتریکی اعمالی باشد . پس با محاسبه رابطه ۳-۱۰ اندازه $g(k)$ یعنی تغییر جزئی در تابع توزیع الکترونها تحت تأثیر میدان الکتریکی خارجی بدست می آید . اگر بتوان $g(k)$ را با دقت بالایی از حل معادله بازگشتی ۳-۱۰ محاسبه نمود ، با کمک آن خواهیم توانست

پارامترهای الکتریکی ماده نیمرسانا نظیر تحرک پذیری^(۱) را با کمک رابطه زیر محاسبه کنیم بطوریکه خواهیم داشت [۱۰]:

$$\mu_e = \frac{\int \vec{V} \cdot \vec{E} f(k) d^3k}{E^2 \int f(k) d^3k} \quad 3-11$$

با جایگذاری مقدار تابع توزیع الکترونها $f(k)$ از رابطه ۵-۳ در رابطه فوق و انتگرالگیری از آن در سیستم مختصات کروی خواهیم داشت:

$$\mu_e = \frac{\int V E \cos \theta (f + g \cos \theta) k^2 dk \sin \theta d\theta d\phi}{E^2 \int (f + g \cos \theta) k^2 dk \sin \theta d\theta} \quad 3-12$$

مقادیر مشابه را در صورت و مخرج اگر حذف کنیم، خواهیم داشت:

$$\mu_e = \frac{\int V E f k dk \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta + \int V E g k^2 dk \int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \theta d\theta}{E^2 \int f k^2 dk \int_0^\pi \sin \theta d\theta + E^2 \int f k^2 dk \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta} \quad 3-13$$

در محاسبه انتگرال های فوق از نتایج زیر استفاده می کنیم:

$$\int V E f k^2 dk = 0 \quad \int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \theta d\theta = \frac{2}{3}$$

$$\int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta = 0 \quad \int_0^\pi \sin \theta d\theta = 2$$

در اینصورت خواهیم داشت :

$$\mu_e = \frac{\int V k^2 \left(\frac{g}{E} \right) dk}{\int k^2 f_0 dk} \quad 3-14$$

برای نوار غیر سهموی سرعت گروه به جرم موثر نسبی وابسته بوده و با رابطه زیر بدست

می آید [۱۵]:

$$v(k) = \frac{\hbar k}{m^*} \left(\frac{1}{1 + \alpha E} \right) \quad 3-15$$

با جایگذاری این نتیجه در معادله ۳-۱۴ خواهیم داشت :

$$\mu_e = \frac{\hbar}{m^* E} \cdot \frac{\int_0^\infty \left(\frac{1}{1 + \alpha E} \right) g(k) dk}{\int_0^\infty k^2 f_0(k) dk} \quad 3-16$$

با استفاده از رابطه فوق می توان تحرک پذیری را بر حسب جرم موثر الکترون و اندازه

میدان الکتریکی اعمالی در گستره انرژی الکترونی متفاوت بدست آورد . چنانکه ملاحظه می شود

اگر بتوان $g(k)$ ، تغییر جزئی در تابع توزیع الکترون ها را در اثر پراکندگی با دقت بالایی از معادله

۳-۱۰ محاسبه نمود ، آنگاه تحرک پذیری الکترونی قابل محاسبه است . در فصل آینده نتایج حل

معادله ۳-۱۶ را در محاسبه تحرک پذیری الکترونی بر مواد نیمرسانای GaN ، InN و

$\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ در حد میدان های الکتریکی ضعیف بررسی خواهیم کرد و بستگی آن را به دما و

چگالی الکترونی تحقیق خواهیم نمود .

فصل چهارم

بررسی ساختار بلوری و نواری InGaN
و نتایج و کارهای انجام شده

۱-۴-مقدمه

چنانچه در فصول قبلی اشاره شد ، مطالعه خواص ترابری الکترونها در جامدات بلوری نظیر نیمرساناها که تحت تأثیر میدان الکتریکی خارجی قرار گرفته اند به مشخصه های ساختار بلوری نیمرسانا نظیر نوع شبکه بلوری و ثابت های ساختاری آن نظیر ثابت شبکه بستگی دارد .

همچنین خواص ترابری الکترونها بستگی مستقیم به خواص ساختار نواری و مکانیزم های مختلف پراکندگی الکترون در این مواد دارد . از مطالعه ساختار نوار رسانش ترکیبات نیمرسانا می توان اطلاعات بسیار مهمی مانند جرم موثر الکترون در دره های مختلف انرژی بدست آورد و چنانکه در فصل های پیش نشان داده شد ، مهمترین پارامتری که ذر تحرک پذیری الکترون و حرکت آن در ساختار بلوری ماده نیمرسانا اهمیت دارد اندازه جرم موثر الکترون است . همچنین از اینگونه مطالعات می توان فاصله بین دره ها و شیب نوارهای رسانش که امکان ترابری الکترونها را بین دره ها و نوارهای مختلف رسانش فراهم می سازند ، بدست آورد .

هدف از این پژوهش مطالعه تحرک پذیری الکترونها در نیمرساناهای مرکب نیترا دار نظیر InN و GaN از ترکیبات مواد نیمرسانای گروه III و V جدول تناوبی و همچنین مقایسه پارامترهای الکتریکی این ترکیبات دوتایی با ترکیب سه تایی (آلیاژ) InGa_{۰.۷۸}N با درصد مولی ۰/۲ از ماده نیمرسانای In و ۰/۸ درصد از ماده نیمرسانای Ga است ، In_{۰.۲۲}Ga_{۰.۷۸}N .

در محاسبه پارامتر الکتریکی تحرک پذیری این مواد ، وابستگی تحرک پذیری به دما و چگالی اتم های ناخالصی مقایسه خواهد شد تا بتوان تفاوت های رسانایی ترکیبات دو تایی InN و GaN را با ترکیب سه تایی In_{۰.۲۲}Ga_{۰.۷۸}N بهتر مقایسه نمود و نشان داد که وجود اتم های ناخالصی و آلیاژ نمودن ترکیبات نیمرسانا چه اثری بر خواص الکتریکی و رسانندگی آنها دارد .

برای محاسبهٔ تحرک پذیری الکترونها در این ترکیبات نیمرسانا چنانچه در فصل قبل متذکر شدیم از حل معادلهٔ بولتزمن استفاده شده است. بدین منظور با تعریف یک برنامهٔ ساده کامپیوتری سعی در حل معادلهٔ ترابری بولتزمن به روش برگشت پذیر شده است، بطوریکه این برنامه قادر است پس از حل معادلهٔ بولتزمن، تحرک پذیری الکترونها را در مادهٔ موردنظر در حد میدان های الکتریکی ضعیف محاسبه کند. بدین منظور اثر پراکندگی از فونون های اپتیکی و آکوستیکی، پراکندگی از خاصیت پیزوالکتریک و پراکندگی از اتم های ناخالصی در نظر گرفته شده است که نتایج حاصله از آن برای ترکیب سه تایی $\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$ در ادامهٔ این فصل ارائه خواهد شد. همچنین به منظور آشنایی با برنامه طراحی شده در آخر این پروژه خلاصه ای از آن آورده شده است.

به منظور ارائه نتایج و کارهای انجام پذیرفته در این پژوهش، این فصل به قسمت های زیر تقسیم شده است. در بخش اول ابتدا با توجه به آنکه ترکیبات دو و سه تایی نیترا ت دار نظیر InN ، GaN و $\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$ عموماً در ساختار بلوری زینک بلند^(۱) و وورتسایت^(۲) متبلور می شوند، مروری خلاصه بر مشخصات فیزیکی ساختارهای بلوری این ترکیبات انجام خواهد شد. در بخش دوم با توجه به اهمیت ساختار نواری ترکیبات نیمرسانا در اندازه گیری پارامترهای الکتریکی دربارهٔ ساختار نواری این ترکیبات و پارامترهای مربوطه به آن برای هر ترکیب صحبت خواهیم کرد. سپس در بخش سوم، آهنگ های پراکندگی از عوامل مختلفی چون فونون های آکوستیکی، فونون های اپتیکی، اثر پیزوالکتریک و اتم های ناخالصی را برای ترکیب نیمرسانای

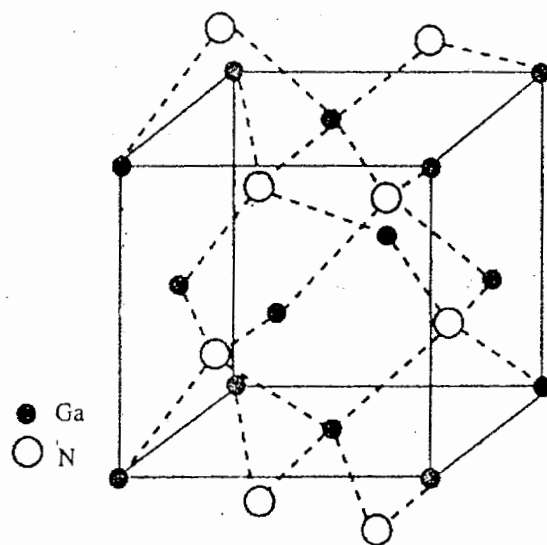
$\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ بدست آورده و آنرا با آهنگ پراکندگی برای ترکیب نیمرسانای GaN که در فصل دوم انجام شده است مقایسه خواهیم نمود.

نهایتاً در بخش چهارم با حل معادله بولتزمن به روش برگشت پذیر، تحرک پذیری ترکیب نیمرسانای $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ را بصورت توابعی از دما و چگالی اتم های ناخالصی محاسبه نموده و آن را با ترکیبات نیمرسانای InN و GaN مقایسه خواهیم نمود.

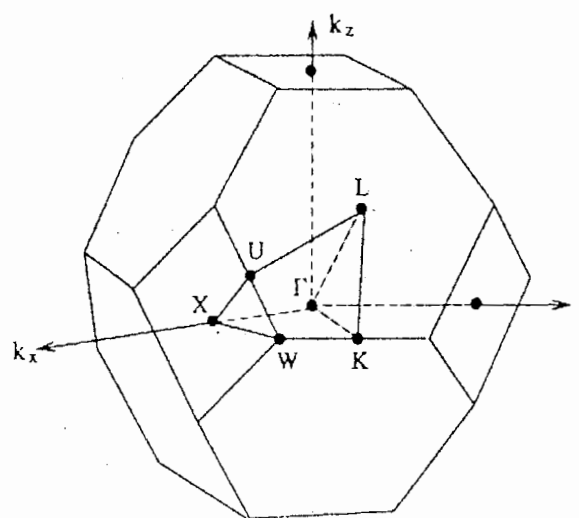
۲-۴- ساختار بلوری ترکیبات نیمرسانای InN, GaN و $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$

ترکیبات نیمرسانای InN, GaN عموماً در ساختار بلوری وورتسایت و زینک بلند متبلور می شوند. هر چند که رشد در ساختار بلوری وورتسایت شایع ترین روش رشد این ترکیبات است ولی می توان تحت شرایط خاص و روش های رشد بلور ویژه این ترکیبات را در ساختار مکعبی زینک بلند رشد داد. به هر حال چنانکه می دانیم ویژگی های ساختاری اینگونه شبکه های بلوری نظیر ثابت های شبکه، نوع شبکه بلوری، تقارن های شبکه ای، تعداد همسایه های اول و ... کاملاً با یکدیگر متفاوت است.

به عنوان معرفی ساختار بلوری ترکیب نیمرسانای GaN در ساختار زینک بلند در شکل (۱-۴- الف) نشان داده شده است.



(الف)



(ب)

شکل ۴-۱- الف - ساختار بلوری زینک بلند نیمرسانای GaN

۴-۱- ب - اولین منطقه بریلوئن بلوری زینک بلند همراه با نقاط و راستاهای اصلی تقارن

همچنانکه از شکل ملاحظه می شود ، ساختار بلوری زینک بلند از دو شبکه مکعبی fcc^(۱) که در طول قطر اصلی مکعب به اندازه $\frac{1}{4}$ قطر اصلی در یکدیگر فرو رفته اند تشکیل شده است . در این ساختار اتم های Ga بر روی یکی از شبکه های مکعبی fcc و اتم های N بر روی شبکه مکعبی fcc دیگر قرار گرفته اند . بنابراین هر اتم گالیم یا ازت توسط چهار اتم از نوع مخالف (همسایه اول) احاطه شده است . سلول واحد اینگونه ساختار نواری یک چهار وجهی است بطوریکه بردارهای اولیه این سلول واحد بر حسب ثابت شبکه a در سیستم مختصات دکارتی عبارتند از :

$$\bar{a} = \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) a$$

$$\bar{b} = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right) a$$

۴-۱

$$\bar{c} = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0 \right) a$$

همچنین شکل ۴-۱-ب اولین منطقه بریلوئن برای ساختار زینک بلند GaN نشان داده شده است . چنانکه ملاحظه می شود ، اولین منطقه بریلوئن یک چهارده وجهی به حجم $4\left(\frac{\sqrt{2}\pi}{a}\right)^3$ است . این چهارده وجهی از شش مربع که بر جهت بلوری $\langle 100 \rangle$ عمود است و هشت شش گوشه که بر جهت بلوری $\langle 111 \rangle$ عمود است ، تشکیل شده است .

در این شکل همچنین نقاط با تقارن بالای Γ, X, L نشان داده شده است . که در آن Γ مرکز منطقه بریلوئن است ، یعنی جایی که تمامی الکترونها در غیاب هر گونه میدان الکتریکی اعمالی و حتی در حضور میدان های الکتریکی ضعیف قرار دارند .

L, X در واقع مراکز مربع ها و شش گوشه ها هستند. همانگونه که در بخش بعد نشان خواهیم داد این نقاط معرف دره های بالاتر در نوار رسانش این بلور می باشند و الکترونها فقط هنگامی می توانند در این دره ها وجود داشته باشند که انرژی کافی را برای گسیل از دره مرکزی Γ به دره های بالاتر L, X کسب کرده باشند که این امر فقط در حد میدان های الکتریکی قوی رخ خواهد داد.

بطور مشابه چنانچه بجای اتم های گالیم در شکل ۴-۱- الف اتم های ایندیم قرار گیرد این شکل معرف ساختار بلوری ترکیب نیمرسانای InN خواهد بود و اگر بجای برخی اتم های گالیم در شکل ۴-۱- الف اتم های ایندیم قرار گیرد، ساختار بلوری InGaN نتیجه خواهد شد.

ساختار بلوری وورتسایت در مورد ترکیب نیمرسانای GaN در شکل ۴-۲ - الف نشان داده شده است. شبکه بلوری وورتسایت در واقع از دو شبکه شش گوشه به هم پکیده^(۱) (HCP) که در امتداد ثابت شبکه c به اندازه ثابت $u = \frac{3}{8}$ جابجا شده اند تشکیل شده است. فاصله بین اتم های واقع در صفحات افقی با ثابت شبکه a نشان داده می شود، بطوریکه در هر ساختار بلوری وورتسایت نسبت c/a همواره مقدار ثابت $1/63$ را داراست.

سلول واحد اینگونه ساختار نواری به شکل منشور است بطوریکه بردارهای اولیه این سلول واحد بر حسب ثابت های شبکه ای a, c در سیستم مختصات کارتزین عبارتند از:

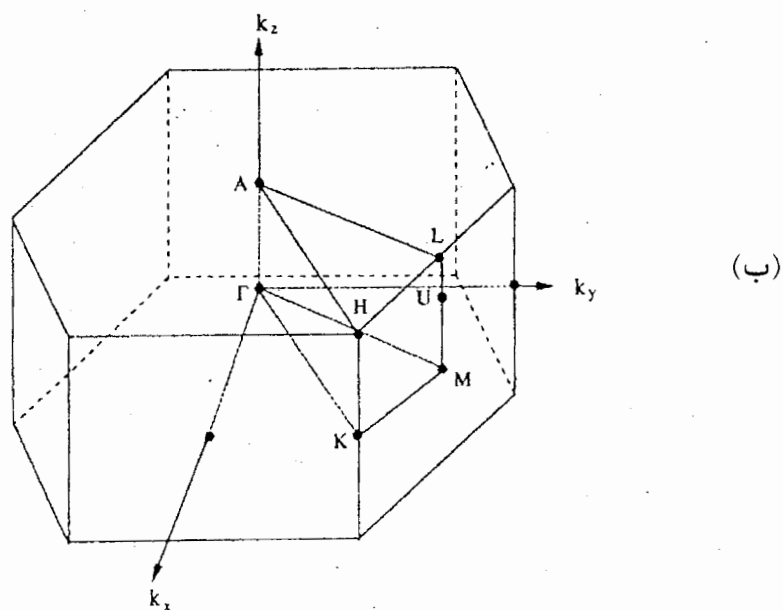
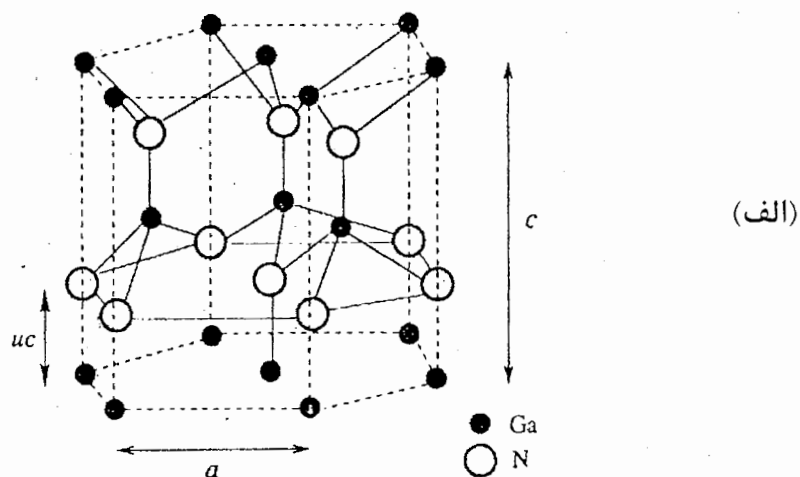
$$\bar{a} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0 \right) a$$

$$\bar{b} = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, \frac{1}{2} \right) a$$

۴-۲

$$\bar{c} = \left(0, 0, 0, \frac{c}{a} \right) a$$

همچنین در شکل ۲-۴-ب اولین منطقه بریلوئن ساختار بلوری وورتسایت نشان داده شده است.



شکل ۲-۴-الف - ساختار بلوری وورتسایت نیم رسانای GaN

ب - اولین منطقه بریلوئن بلوری وورتسایت همراه با نقاط و راستاهای اصلی تقارن

چنانکه ملاحظه می شود . اولین منطقه بریلوئن یک منشور شش وجهی است که دارای

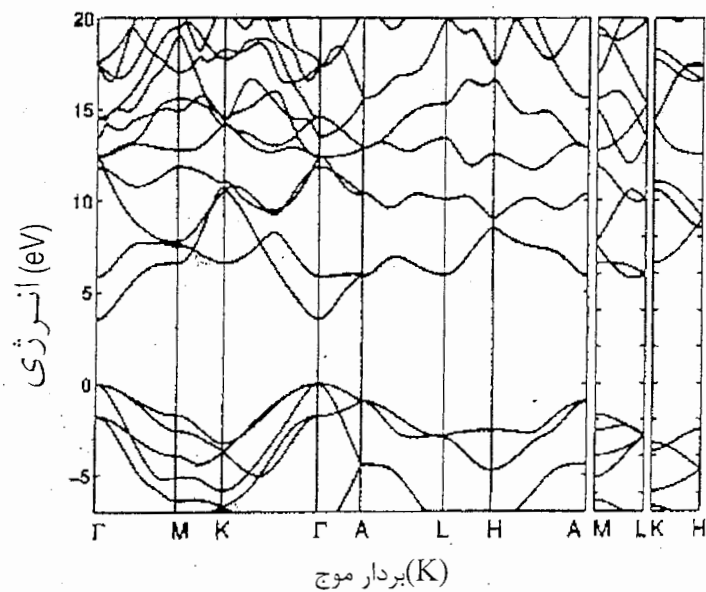
حجمی برابر $\frac{2}{\sqrt{3}} \frac{(\pi)^3}{a_c^3}$ است . در این شکل همچنین Γ مرکز منطقه بریلوئن (پایین ترین دره

نوار رسانش) و دیگر نقاط با تقارن بالا نظیر M , K , L نشان داده شده است که معرف دیگر دره های نوار رسانش است .

مانند ساختار بلوری زینک بلند ، اگر بجای تمامی اتمهای گالیم در شکل ۲-۴ الف اتم های ایندیم قرار گیرد ، این شکل معرف ساختار بلوری InN خواهد بود و اگر بجای برخی اتم های گالیم اتم های ایندیم قرار گیرد ، ساختار بلوری InGaN نتیجه خواهد شد .

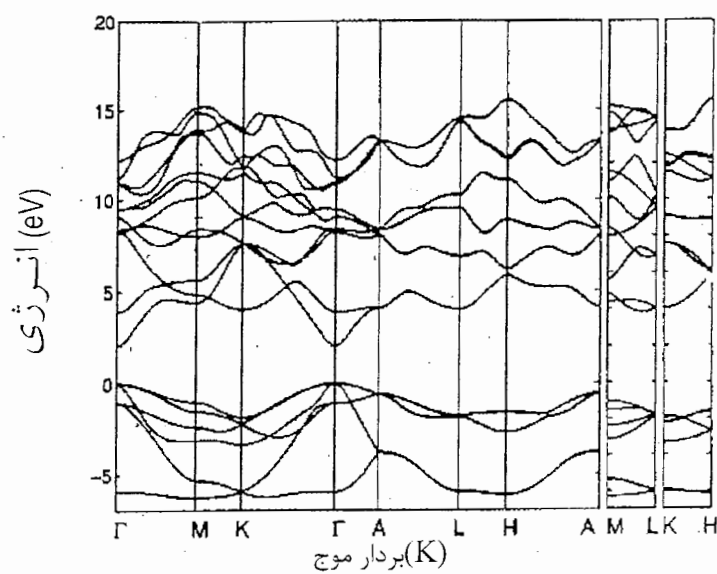
۳-۴- ساختار نواری ترکیبات نیمرسانای InN , GaN و $\text{In}_{x/2}\text{Ga}_{1-x/2}\text{N}$

خواص الکتریکی و رسانندگی الکترونها در هر ماده نیمرسانایی به ساختار نواری و پارامترهای وابسته به آن بستگی دارد . چنانچه در فصل اول اشاره شد روش های متعددی برای محاسبه ساختار نواری و تغییرات نوارهای انرژی بر حسب بردار موج شبکه وارون در هر ساختار بلورین وجود دارد . یکی از این روش ها ، روش شبه پتانسیل بود که با جایگزینی پتانسیل واقعی بلور با یک پتانسیلی که در ناحیه مغزهای یونی رفتار نسبتاً آرامتری را نشان می دهد می توان تغییرات نوارهای انرژی را محاسبه نمود . اگر از محاسبات ساختار نواری ترکیبات نیمرسانای InN , GaN و $\text{In}_{x/2}\text{Ga}_{1-x/2}\text{N}$ که به روش شبه پتانسیل انجام شده استفاده کنیم [۱۱] ، می توان نمودار ساختار نواری این ترکیبات را در ساختار بلوری وورتسایت در امتداد محورهای با تقارن بالا در طول مناطق بریلوئن در اشکال ۳-۴ ، ۴-۴ و ۴-۵ ملاحظه نمود .



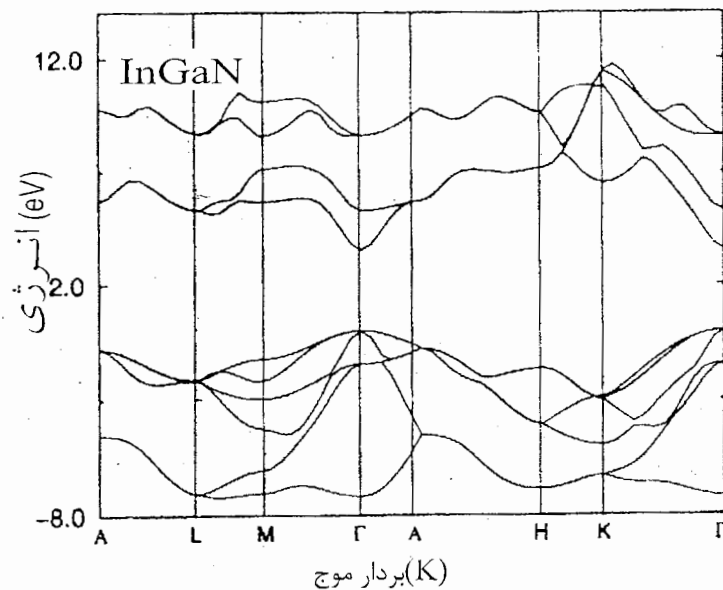
شکل ۳-۴- ساختار نواری نیمرسانای GaN در ساختار بلوری وورتسایت در امتداد محورهای با تقارن

بالا در طول مناطق بریلوئن بر اساس مدل شبه پتانسیل [۱۱]



شکل ۴-۴- ساختار نواری نیمرسانای InN در ساختار بلوری وورتسایت در امتداد محورهای با تقارن بالا

در طول مناطق بریلوئن بر اساس مدل شبه پتانسیل [۱۱]



شکل ۵-۴- ساختار نواری نیمرسانای $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ ر ساختار بلوری وورتسایت در امتداد محورهای

با تقارن بالا در طول مناطق بریلوئن بر اساس مدل شبه پتانسیل [۱۱]

مقایسه ای از ساختار نواری این ترکیبات نشان می دهد که هر سه ترکیب ، نیمرساناهایی با گاف انرژی مستقیم می باشند ، (زیرا پایین ترین لبه دره مرکزی Γ از نوار رسانش بر بالاترین لبه قله نوار ظرفیت منطبق است) هر چند که اندازه گاف انرژی این سه ترکیب با یکدیگر متفاوت است .

همچنین مقایسه ای از ساختار نواری این ترکیبات نشان می دهد که اولاً فاصله دره های انرژی این ترکیبات با یکدیگر یکسان نبوده و ثانیاً انحنای نوارهای انرژی که منجر به تغییر جرم موثر الکترون در هر دره و نوار می شود با یکدیگر فرق می کند این تفاوت باعث تغییرات خواص

$$\text{ترابری الکترونها در این ترکیبات می شود } (m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2})$$

هدف از این پژوهش محاسبه خواص رسانندگی الکتریکی این ترکیبات در حد میدان های الکتریکی ضعیف ($E < 10^5 \text{ N/m}$) است. لذا فرض می شود که الکترونها در طی فرآیندهای ترابری صرفاً در دره مرکزی نوار رسانش (Γ) قرار داشته باشند. بنابراین در مطالعه حاضر فقط انحنای دره مرکزی و جرم مؤثر الکترون در آن دارای اهمیت است. اما اگر هدف بررسی ترابری الکترونها در حد میدان های الکتریکی قوی $E > 10^5 \text{ N/m}$ باشد، جرم مؤثر الکترون در دیگر دره های نوار رسانش نظیر دره K ، M ، ... انحنای این نوارها و همچنین فواصل آنها از یکدیگر در محاسبه خواص رسانندگی الکتریکی حائز اهمیت خواهد بود.

به هر حال همانگونه که اشاره شد در این بررسی ترابری الکترونها در دره مرکزی Γ منظور شده است. بطوریکه رابطه بین انرژی و بردار موج K با در نظر گرفتن اثرات انحراف از سهموی بودن نوار Γ بصورت زیر فرض شده است [۸]:

$$E(1 + \alpha E) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad 4-3$$

که در آن m^* جرم مؤثر الکترون در دره Γ و α ضریب انحراف از سهموی بودن دره Γ است که مقدار آن به گاف انرژی و جرم مؤثر الکترون بستگی دارد بطوریکه داریم [۸]:

$$\alpha = \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{m^*}{m_0}\right)^2 \quad 4-4$$

که در آن m_0 جرم الکترون آزاد است.

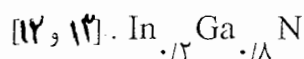
در جدول ۴-۱ پارامترهای ساختار نواری ترکیبات نیمرسانای InN، GaN و

$\text{In}_{x/8}\text{Ga}_{1-x/8}\text{N}$ که در محاسبه خواص ترابری الکترونها در این پژوهش از آنها استفاده شده است

با یکدیگر مقایسه شده است.

ترکیب	گاف انرژی E_g (eV)	جرم موثر الکترون m^* / m_0	ضریب انحراف دره Γ α (eV) ⁻¹
GaN	۳/۳۸	۰/۲	۰/۱۸۹
InN	۱/۸۹	۰/۱۱	۰/۱۳۵
In _{۰/۲} Ga _{۰/۸} N	۲/۸۸	۰/۱۷	۰/۱۸۸

جدول ۴-۱- مشخصات پارامترهای نواری برای دره مرکزی Γ در ترکیبات نیمرسانای GaN، InN و



۴-۴- محاسبه آهنگ پراکندگی در ترکیب نیمرسانای In_{۰/۲}Ga_{۰/۸}N

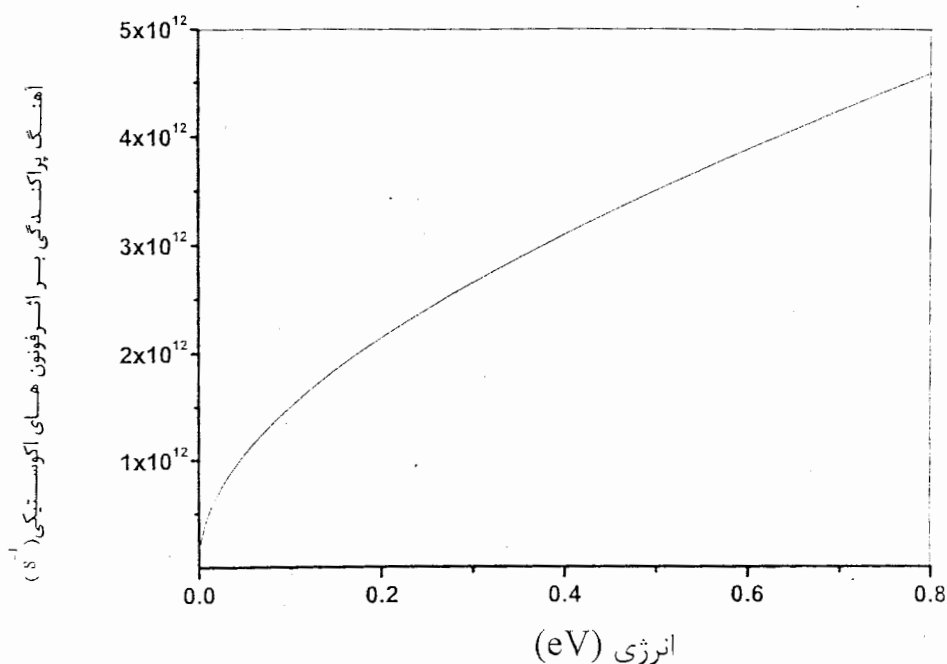
یکی از مهمترین عوامل محدود کننده رسانندگی الکتریکی ترکیبات نیمرسانا اندازه آهنگ پراکندگی الکترونها هنگام اعمال میدان الکتریکی خارجی است. چنانکه در فصل دوم بطور اجمال بحث شد، از مهمترین عوامل پراکندگی الکترونها می توان به پراکندگی ناشی از فونون ها (فونون های اپتیکی و آکوستیکی) و پراکندگی ناشی از عیوب شبکه بلوری مانند حضور اتم های ناخالصی اشاره نمود. همانطور که در فصل دوم بررسی شد، آهنگ پراکندگی به سطح مقطع پراکندگی الکترونها بین حالات انرژی متفاوت $s(k, k')$ ، و زاویه بین برخورد الکترونها با عوامل گوناگون بستگی دارد، و چنانکه ملاحظه گردید آهنگ پراکندگی از این عوامل با استفاده از قاعده طلایی فرمی قابل محاسبه بود. در هر مورد رابطه کلی آهنگ پراکندگی بر حسب تابعی از انرژی الکترون، جرم موثر آن و دیگر پارامترهای الکتریکی و ساختاری ماده نیمرسانا بیان شده است. در این قسمت آهنگ های پراکندگی ناشی از فونون های آکوستیکی، فونون های اپتیکی، اتم های ناخالصی و اثر پیزوالکتریک در ترکیب نیمرسانای In_{۰/۲}Ga_{۰/۸}N بر حسب تابعی از انرژی

الکترون‌ها نشان داده شده است. پارامترهای ساختاری و الکتریکی استفاده شده در محاسبه آهنگ های پراکندگی برای ترکیب نیمرسانای $\text{In}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{N}$ در مقایسه با دیگر ترکیبات InN و GaN در جدول ۲-۴ نشان داده شده است.

پارامتر	GaN	InN	$\text{In}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{N}$
(m/s^2) چگالی	۶۱۰۰	۶۸۱۰	۶۲۴۲
ϵ_0 ثابت دی الکتریک در فرکانس کم	۱۰/۴	۱۵/۳	۱۱/۳۸
ϵ_∞ ثابت دی الکتریک در فرکانس بالا	۵/۴۷	۸/۴	۶/۵۶
$\hbar\omega_{\text{op}}$ انرژی فونون های اپتیکی (meV)	۹۱	۸۹	۹۰
(cm^{-2}) ثابت پیزوالکتریک	۰/۵	۰/۳	۰/۴۶
(eV) ثابت پتانسیل آکوستیکی	۹/۲	۸/۵	۹/۰۶
(°A) ثابت شبکه	۴/۵	۴/۹۸	۴/۵۹
(m/s) سرعت صوت	5×10^3	5×10^3	5×10^3

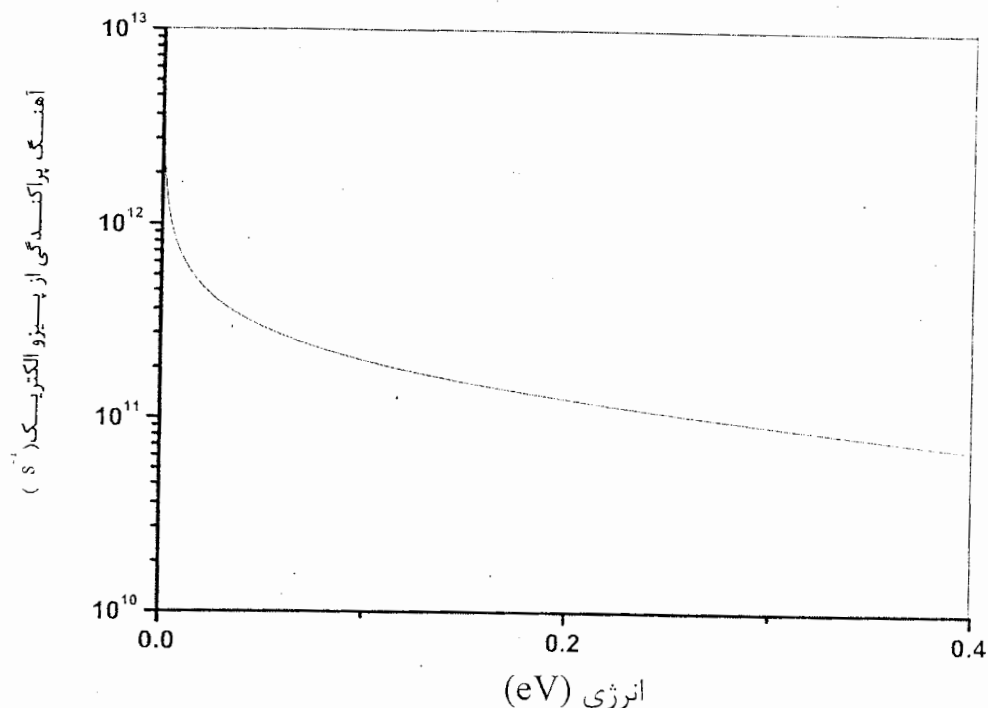
جدول ۲-۴ - پارامترهای فیزیکی مربوط به سه ترکیب نیمرسانای InN و GaN و $\text{In}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{N}$

در ساختار بلوری وورتسایت در دمای اتاق [۱۳، ۱۴ و ۱۵]



شکل ۴-۶- آهنگ پراکندگی الکترونها در دره مرکزی Γ از فونون های آکوستیکی را بر حسب تابعی از انرژی برای نیمرسانای مرکب $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ در دمای اتاق

شکل ۴-۶ آهنگ پراکندگی الکترونها در دره مرکزی Γ از فونون های آکوستیکی را بر حسب تابعی از انرژی برای نیمرسانای مرکب $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ نشان می دهد. چنانکه ملاحظه می شود با افزایش انرژی الکترون ها تحت تأثیر میدان الکتریکی خارجی آهنگ پراکندگی الکترونها افزایش می یابد. بطوریکه در دمای اتاق و در انرژی الکترونی 0.18 eV آهنگ پراکندگی الکترونها حدوداً به 4×10^{12} برخورد در هر ثانیه افزایش می یابد، تغییر آهنگ پراکندگی الکترونها از فونون های آکوستیکی در دماهای متفاوت نشان می دهد که در دماهای بالا اثر پراکندگی الکترونها از فونون های آکوستیکی از اهمیت بیشتری برخوردار است. همچنانکه آنرا در محاسبه تحرک پذیری الکترونها بر حسب تابعی از دما برای رسانندگی الکتریکی نیمرسانای $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ مشاهده خواهیم نمود.

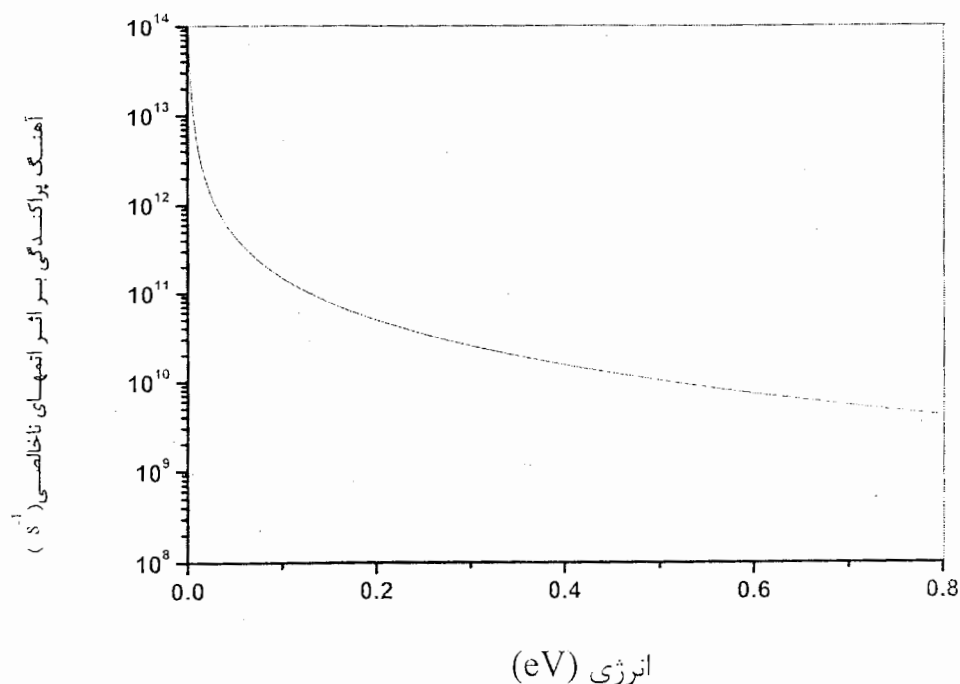


شکل ۴-۷ - آهنگ پراکندگی الکترونها در دره مرکزی Γ ناشی از اثر پیزوالکتریک در

نیمرسانای $\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$ و در دمای اتاق

شکل ۴-۷ آهنگ پراکندگی الکترونها در دره مرکزی Γ را ناشی از اثر پیزوالکتریک در نیمرسانای $\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$ و در دمای اتاق نشان می دهد. با توجه به آنکه آهنگ پراکندگی الکترونها در اثر خاصیت پیزوالکتریک با انرژی بصورت تابع $E^{-1/2}$ کاهش می یابد، ملاحظه می شود که با افزایش انرژی الکترونها از صفر به 0.4 eV ، آهنگ پراکندگی الکترونها بطور خیلی سریع از مقدار ماکزیمم 2×10^{12} برخورد در هر ثانیه به کمتر از 10^{11} برخورد در هر ثانیه کاهش می یابد. لذا می توان نتیجه گرفت که پراکندگی از اثر پیزوالکتریک فقط در حد انرژی های الکترونی ضعیف دارای اهمیت است و در حد میدان های الکتریکی قوی که در آن انرژی الکترونها بالاست اثر قابل توجهی در پراکندگی الکترونها ندارد.

پیزوالکتریک فقط در حد انرژی های الکترونی ضعیف دارای اهمیت است و در حد میدان های الکتریکی قوی که در آن انرژی الکترونها بالاست اثر قابل توجهی در پراکندگی الکترونها ندارد. از مقایسه آهنگ پراکندگی پیزوالکتریک در دو ترکیب نیمرسانای GaN نشان داده شده در فصل دوم و آهنگ پراکندگی آن در ترکیب نیمرسانای $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ (شکل ۴-۷) ملاحظه می گردد که آهنگ پراکندگی الکترونها از اثر پیزوالکتریسته در دمای اتاق و در حد انرژی های پایین در ماده GaN بیشتر از $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ است. بالاتر بودن آهنگ پراکندگی پیزوالکتریسته در GaN به علت جرم موثر بیشتر الکترونها در این ماده در مقایسه با نیمرسانای $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ است ($m^* 0.2$ در GaN و $m^* 0.17$ در $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$) زیرا آهنگ پراکندگی الکترونها در اثر پیزوالکتریک نسبت مستقیم با جرم موثر الکترونها دارد.

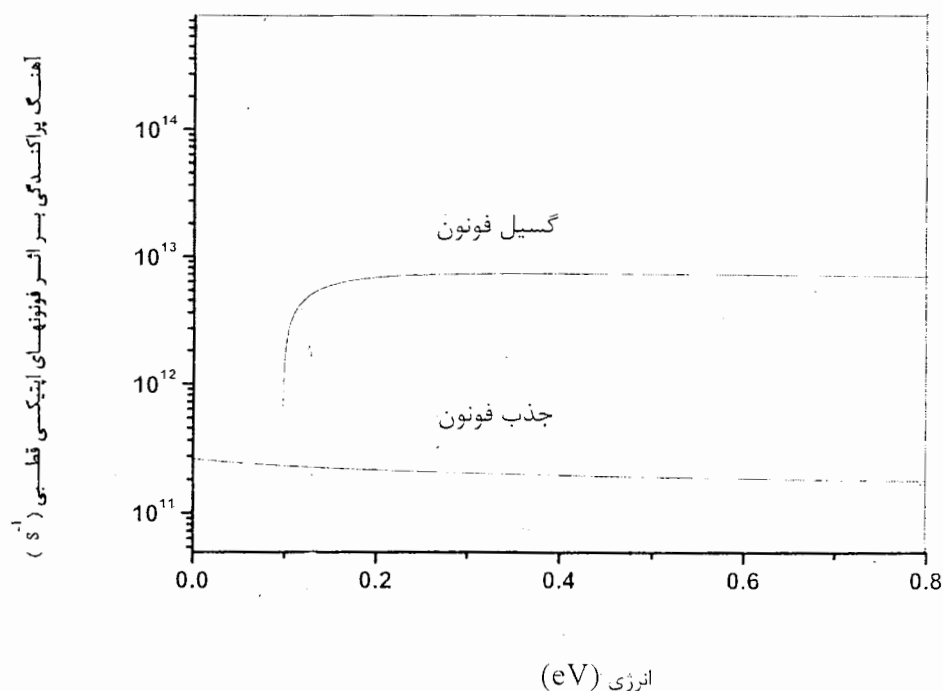


شکل ۴-۸- آهنگ پراکندگی از حضور اتم های ناخالصی با چگالی 10^{22} m^{-3} در دمای اتاق بر حسب تابعی از انرژی الکترونها موجود در دره مرکزی Γ برای نیمرسانای $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ در دمای اتاق

شکل ۸-۴ آهنگ پراکندگی از حضور اتم های ناخالصی با چگالی 10^{22} m^{-3} را در دمای اتاق بر حسب تابعی از انرژی الکترونیهای موجود در دره مرکزی Γ برای نیمرسانای $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ نشان می دهد.

چنانکه ملاحظه می شود، آهنگ پراکندگی از مقدار ماکزیمم 8×10^{13} برخورد در هر ثانیه در انرژی بسیار پایین به مقدار $2/5 \times 10^{10}$ برخورد در هر ثانیه در انرژی الکترونی 0.8 eV کاهش می یابد. لذا اثر غالب این پراکندگی در حد انرژی های الکترونی پایین است.

مقایسه ای از آهنگ پراکندگی از اتم های ناخالصی برای ترکیب نیمرسانای GaN نشان داده شده در فصل دوم، با $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ نشان می دهد که در حد انرژی های الکترونی پایین آهنگ پراکندگی الکترونها از حضور اتم های ناخالصی در GaN به حدود 2×10^{14} برخورد در هر ثانیه می رسد که در مقایسه با ترکیب $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ بیشتر است. این افزایش به دلیل جرم موثر بیشتر الکترونها در ترکیب نیمرسانای GaN در مقایسه با $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ است، زیرا آهنگ پراکندگی از اتم های ناخالصی نسبت مستقیم با جرم موثر الکترونها دارد.



شکل ۹-۴- آهنگ پراکندگی الکترونها در دره مرکزی Γ از فونون های اپتیکی برای هر دو حالت جذب

و گسیل بین ترازهای انرژی متفاوت بر حسب تابعی از انرژی در نیمرسانای $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ در دمای اتاق

شکل ۹-۴ آهنگ پراکندگی الکترونها در دره مرکزی Γ را از فونون های اپتیکی برای هر دو حالت جذب و گسیل بین ترازهای انرژی متفاوت بر حسب تابعی از انرژی در نیمرسانای $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ نشان می دهد. چنانکه ملاحظه می شود در حالت جذب (absorption) آهنگ پراکندگی الکترونها از فونون های اپتیکی در هر سطح انرژی رخ می دهد بطوریکه آهنگ آن بطور متوسط به ازای انرژی های الکترونی متفاوت در حدود 2×10^{11} برخورد در هر ثانیه ثابت می ماند. حال آنکه در حالت گسیل (emission) پراکندگی الکترونها از فونون های اپتیکی صرفاً زمانی رخ می دهد که انرژی الکترونها در ماده نیمرسانای $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ از انرژی

فونون های اپتیکی در این ترکیب نیمرسانا (0.09 eV) بیشتر باشد. در این حالت چنانچه ملاحظه می شود آهنگ پراکندگی الکترونها از صفر به ماکزیمم 10^{13} برخورد در هر ثانیه افزایش می یابد.

۴-۵ - محاسبه تحرک پذیری در حد میدان الکتریکی ضعیف

با محاسبه آهنگ پراکندگی الکترون ها در دره مرکزی Γ در ترکیبات نیمرسانای GaN ، InN و $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ می توان با حل معادله بولتزمن، تحرک پذیری الکترونها را محاسبه نمود. جزئیات حل و بحث معادله بولتزمن به روش برگشت پذیری و چگونگی محاسبه پارامتر تحرک پذیری الکترونها بطور کامل در فصل سوم شرح داده شد. در این بخش نتایج بدست آمده از حل این معادله برای میدان الکتریکی اعمالی $E = 10^4 \text{ N/m}$ بررسی خواهیم کرد.

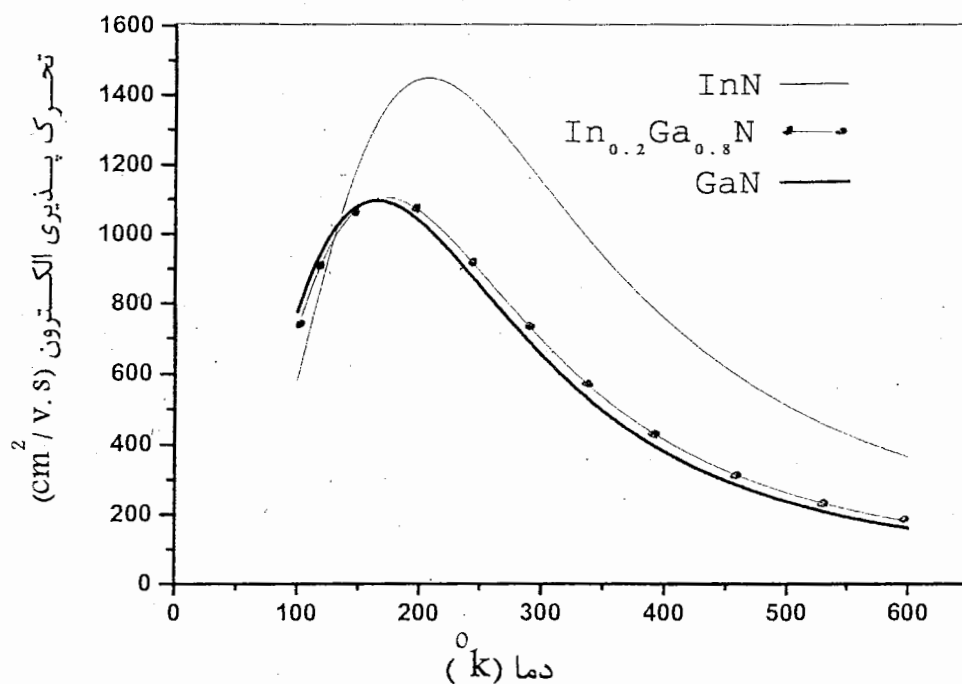
کلیه پارامترهای ساختاری و الکتریکی استفاده شده برای محاسبه تحرک پذیری در جدول ۴-۱ و ۴-۲ ذکر شده است. با استفاده از این پارامترها سعی شده است نمودار تغییرات تحرک پذیری این سه ترکیب در مقایسه با یکدیگر و بر حسب تابعی از دما و چگالی الکترونی متفاوت رسم شود تا بهتر بتوان ویژگی های رسانایی الکتریکی این ترکیبات نیمرسانا را با یکدیگر مقایسه نمود.

بعنوان مثال شکل ۴-۱۰ نمودار تغییرات تحرک پذیری بر حسب دما را برای سه ترکیب نیمرسانای InN ، GaN و $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ نشان می دهد. در این محاسبه چگالی الکترونها در هر سه مورد 10^{23} m^{-3} در نظر گرفته شده است. چنانکه ملاحظه می شود تحرک پذیری الکترونی در نیمرسانای InN در تمامی دماها بیشتر از GaN و $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ است. بطوریکه

ماکزیمم مقدار آن در دمای $T = 200^\circ \text{K}$ در حدود $1400 \frac{\text{cm}^2}{\text{V.S}}$ است و سپس در اثر آهنگ

پراکندگی از فونون های اپتیکی به شدت افت نموده بطوریکه در دمای اتاق به حدود

$1100 \frac{\text{cm}^2}{\text{V.S}}$ کاهش می یابد.



شکل ۱۰-۴- نمودار تغییرات تحرک پذیری بر حسب دما را برای سه ترکیب نیمرسانای InN، GaN و

$\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ در چگالی $1.023 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$

همچنین این شکل نشان می دهد که تحرک پذیری ترکیب نیمرسانای $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ نیز

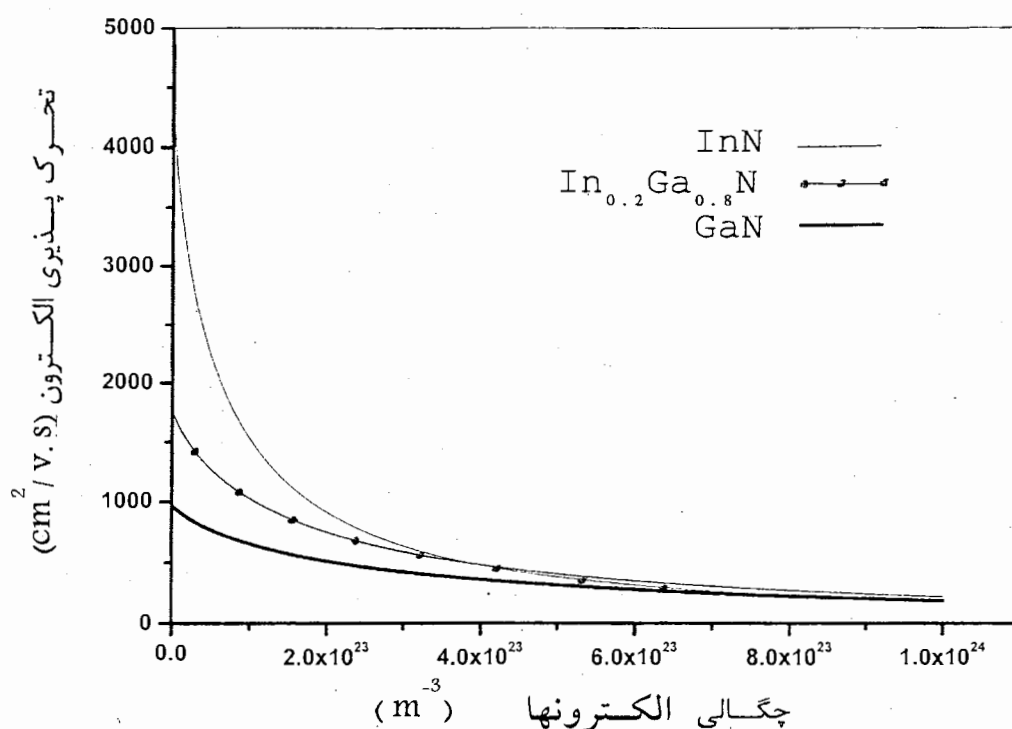
از نیمرسانای GaN اندکی بیشتر است. بطوریکه در دمای اتاق تحرک پذیری بدست آمده برای

$\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ در حدود $750 \frac{\text{cm}^2}{\text{V.S}}$ است در صورتیکه برای نیمرسانای GaN در حدود

$650 \frac{\text{cm}^2}{\text{V.s}}$ است. تحرک پذیری بیشتر ترکیب نیمرسانای $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ در مقایسه با GaN

به علت جرم موثر کمتر الکترون در این ماده در مقایسه با GaN است، ($0.2 m_0$ در مقایسه با

$0.17 m_0$).



شکل ۴-۱۱- نمودار تغییرات تحرک پذیری در سه نیمرسانا InN ، $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ ، GaN

در دمای اتاق بر حسب چگالی الکترونی

شکل ۴-۱۱- نمودار تغییرات تحرک پذیری در سه نیمرسانا InN ، InGaN ، GaN در دمای

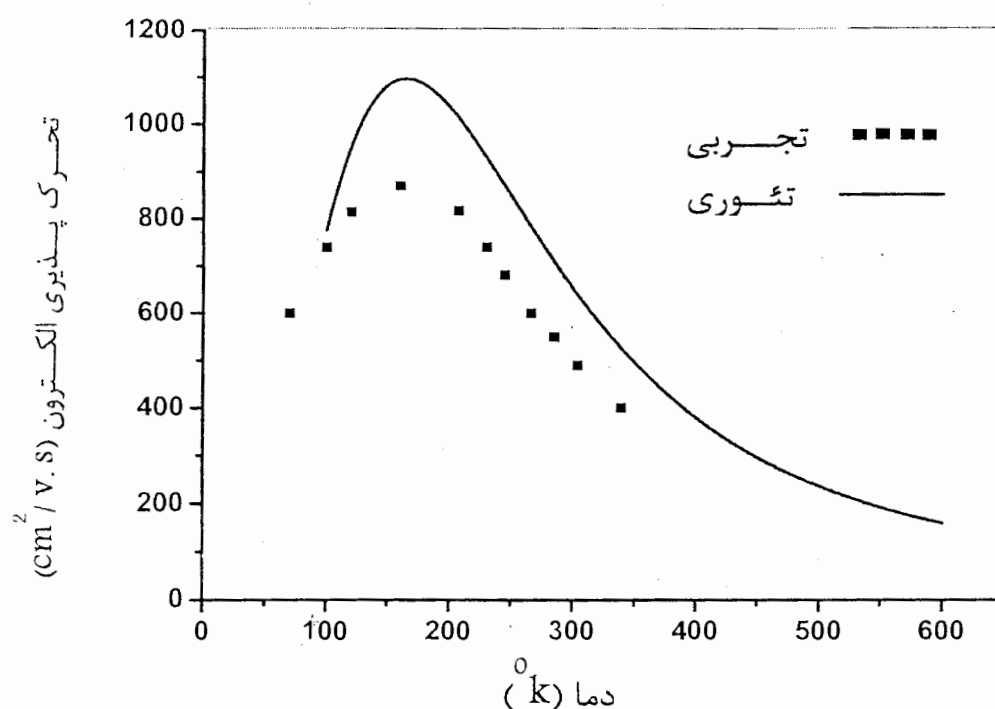
اتاق بر حسب تابعی از چگالی الکترونیهای آزاد نشان می دهد. چنانکه ملاحظه می شود با افزایش

چگالی الکترونها از 10^{22} الکترون بر هر مترمکعب به 10^{24} بر هر مترمکعب در هر ماده، تحرک

پذیری الکترونها به دلیل افزایش آهنگ پراکندگی کاهش می یابد، اما به هر حال تفاوتی در اندازه

تحرک پذیری، ناشی از تفاوت در پارامترهای الکتریکی و بخصوص جرم موثر الکترون در دره Γ است، ملاحظه می گردد.

به منظور مقایسه ای با دیگر کارهای تئوری و یا تجربی انجام پذیرفته در محاسبه تحرک پذیری الکترونی در ترکیبات نیمرسانای نیترات دار به شکل ۴-۱۲ توجه می کنیم. این شکل نمودار تغییرات تحرک پذیری بر حسب دما را در ترکیب نیمرسانای GaN به ازای چگالی الکترونی 10^{23} cm^{-3} الکترون بر هر مترمکعب (10^{17} cm^{-3} الکترون بر هر سانتی مترمکعب) نشان می دهد.

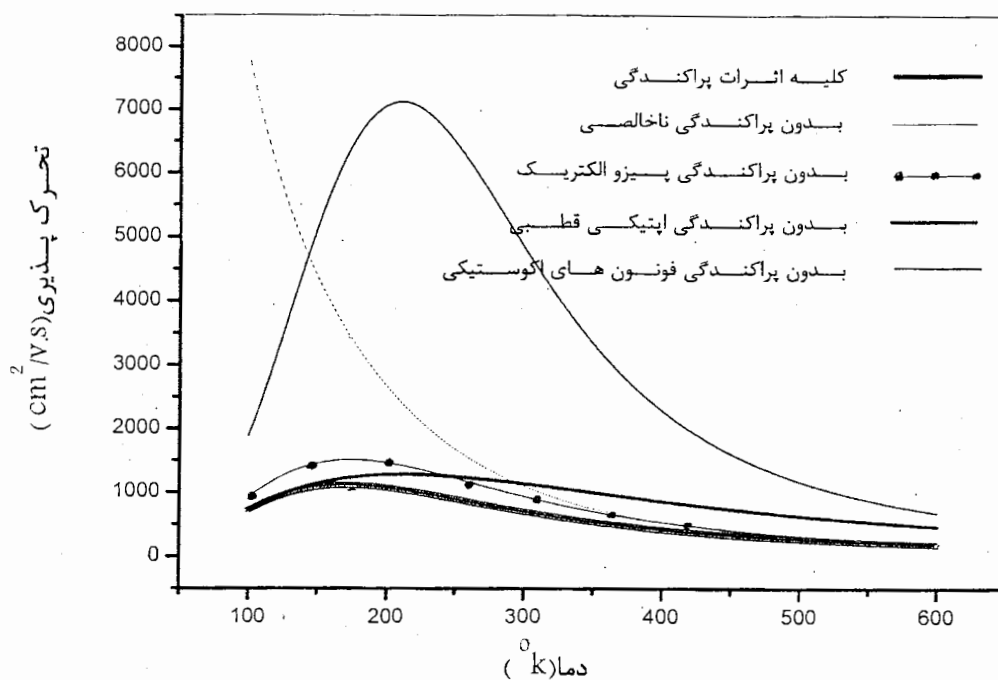


شکل ۴-۱۲ - مقایسه نمودارهای تجربی و تئوری تغییرات تحرک پذیری بر حسب دما در ترکیب

نیمرسانای GaN در چگالی الکترونی 10^{23} m^{-3} [۱۱]

چنانکه ملاحظه می شود ، نمودار تغییرات تحرک پذیری GaN در این تحقیق شباهت کلی با نمودار تحرک پذیری محاسبه شده دارد . نمودار تجربی نشان می دهد که در دمای اتاق برای چگالی الکترونی 10^{23} اتم بر هر متر مکعب (10^{17} cm^{-3}) تحرک پذیری الکترونها در نیمرسانای GaN در حدود $550 \frac{\text{cm}^2}{\text{V.S}}$ است که اگر آنرا با مقدار محاسبه شده در این پژوهش مقایسه کنیم ملاحظه می شود که مقدار محاسبه شده در این پژوهش در دمای اتاق برای چگالی الکترونی 10^{23} اتم بر هر متر مکعب در حدود $600 \frac{\text{cm}^2}{\text{V.S}}$ است که در توافق نسبتاً خوبی با نتایج ارائه شده در این مقاله است .

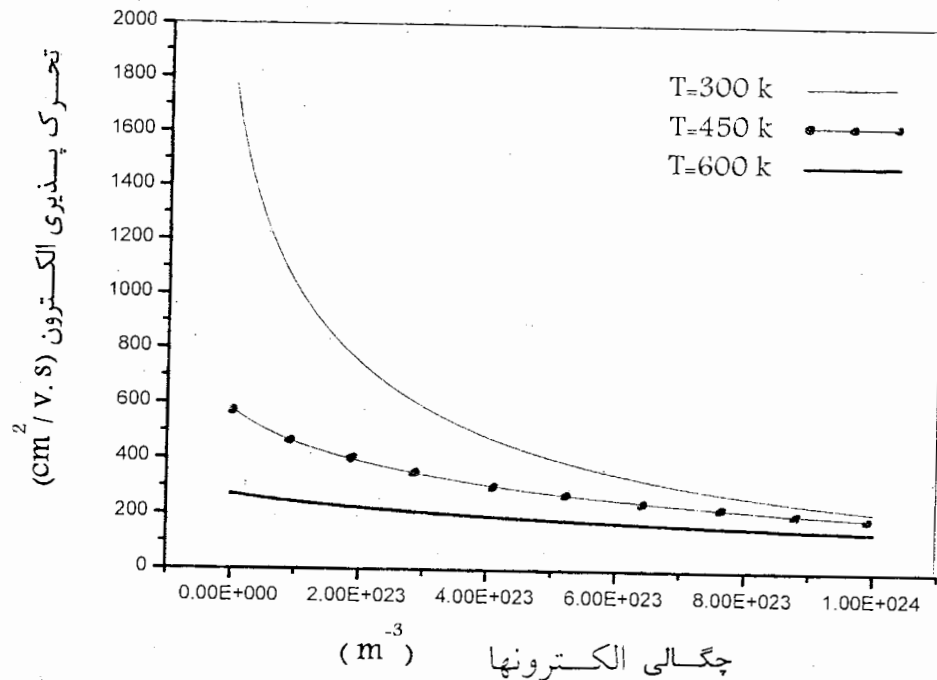
به منظور بررسی اثر پراکندگی الکترونها تحت تأثیر عوامل مختلف پراکندگی ، بر رسانش الکتریکی ترکیبات نیمرسانای متفاوت ، در شکل ۱۳ - ۴ تحرک پذیری الکترونها در ترکیب نیمرسانای $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ بر حسب تابعی از دما در غیاب برخی از عوامل پراکندگی مهم در مقایسه با نمودار کلی نشان داده شده است .



شکل ۱۳-۴ - تحرک پذیری الکترونها در ترکیب نیمرسانای $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ بر حسب تابعی از دما

در غیاب برخی از عوامل پراکندگی مهم در مقایسه با نمودار کلی

بطور مثال چنانکه در این شکل دیده می شود تحرک پذیری الکترونها در غیاب پراکندگی از اتم های ناخالصی در دماهای پایین به شدت افزایش می یابد. این شکل بوضوح نشان می دهد که اثر پراکندگی از اتم های ناخالصی بر تحرک پذیری الکترونها در دماهای پایین بسیار شدیدتر است. علت این امر هم آنستکه در دماهای پایین انرژی جنبشی الکترونها به شدت کاهش می یابد و این امر باعث می شود که الکترونها به آهستگی از کنار اتم های ناخالصی حرکت کنند و لذا اثر پتانسیل دافعه کولنی بین اتم ناخالصی و الکترون بیشتر بوده و بنابراین آهنگ پراکندگی از اتم های ناخالصی به شدت افزایش می یابد.



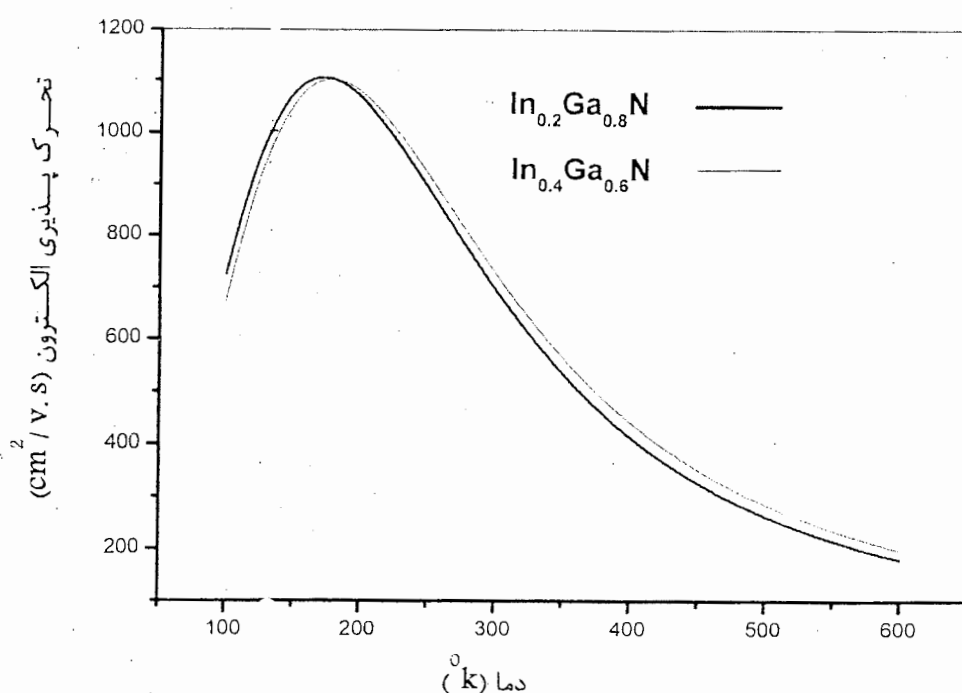
شکل ۱۵-۴ - تغییرات تحرک پذیری الکترونها در دره Γ برای ترکیب نیمرسانای $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ بر حسب تابعی از چگالی اتم های ناخالصی در دماهای $T=600$ ، $T=450$ ، $T=300\text{K}$

شکل ۱۴-۴ نشان می دهد که با افزایش چگالی الکترونها در ترکیب نیمرسانای $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{N}$ از 10^{21}cm^{-3} به 10^{23}cm^{-3} تحرک پذیری الکترونها به دلیل افزایش آهنگ پراکندگی کاهش می یابد.

شکل ۱۵-۴، تغییرات تحرک پذیری الکترونها را بر حسب چگالی الکترونها در دماهای متفاوت نشان می دهد. چنانکه ملاحظه می شود با افزایش دما از 300°K به 600°K ، تحرک پذیر الکترونها به سرعت به ازای کلیه چگالی الکترونی متفاوت کاهش می یابد. دلیل کاهش تحرک پذیری الکترونی در دماهای بالاتر این است که با افزایش دما، آهنگ پراکندگی از

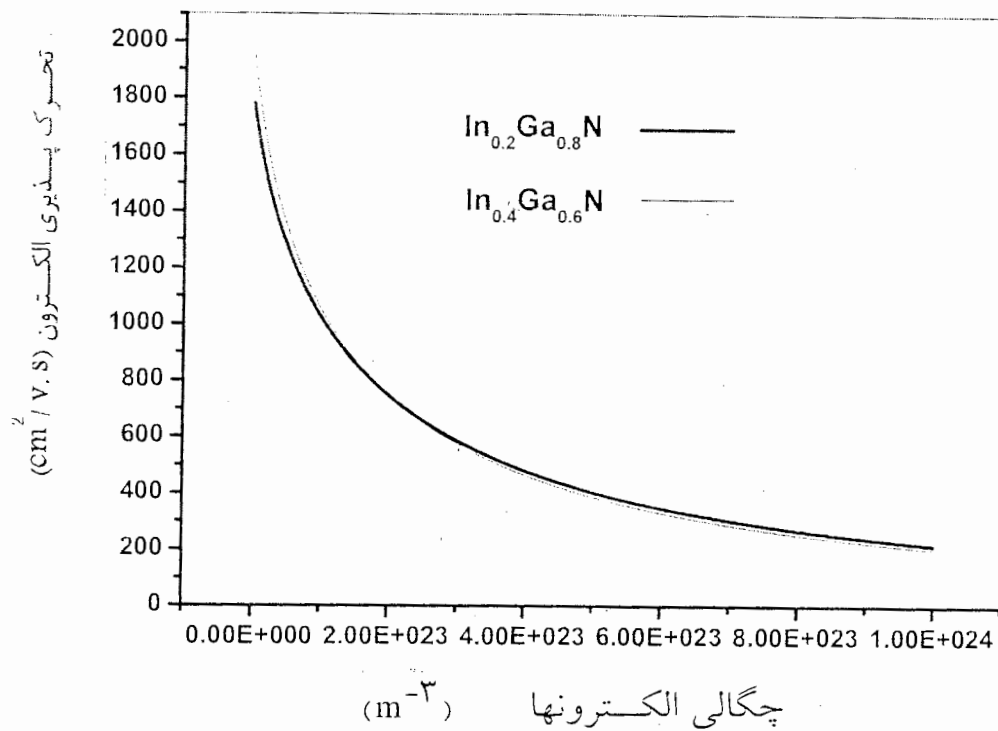
فونون های آکوستیکی ، اپتیکی افزایش می یابد . زیرا افزایش دما باعث افزایش ارتعاشات شبکه شده و بنابراین انرژی فونون های اپتیکی و صوتی افزایش می یابد . چنین افزایشی در انرژی فونون ها باعث برهمکنش قوی بین الکترون و این فونون ها شده که نتیجه آن افزایش آهنگ پراکندگی الکترونها و نهایتاً کاهش تحرک پذیری است . این شکل به وضوح چنین اثراتی در تحرک پذیری الکترونها در نیمرسانای $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ را نشان می دهد .

به منظور مقایسه ای از اثرات ترکیب درصد وزنی عنصر In در ترکیب نیمرسانای InGaN بر رسانش الکتریکی این ماده نیمرسانا محاسبات تحرک پذیری الکترونها را بر حسب دما و چگالی الکترونها برای دو ترکیب نیمرسانا $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ و $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$ انجام داده ایم . شکل های ۱۶-۴ و ۱۷-۴ نتایج بدست آمده را نشان می دهند .



شکل ۱۶-۴ - نمودار تحرک پذیری الکترون بر حسب دما برای دو ترکیب

$$\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N} \text{ و } \text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$$



شکل ۱۶-۴ - نمودار تحرک پذیری الکترون بر حسب چگالی برای ترکیب

$\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$ و $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ در دمای اتاق

چنانکه از این نمودارها ملاحظه می شود، با تغییر درصد مولی ماده ایندیم از ۰/۲ درصد وزنی به ۰/۴ درصد وزنی، تفاوتی جزئی در تحرک پذیری الکترونها بر حسب تابعی از دما و چگالی الکترونی بدست می آید. دلیل این تفاوت کم آنستکه با تغییر درصد وزنی ایندیم از ۰/۲ تا ۰/۴ تغییرات چندانی در پارامترهای الکتریکی و ساختاری این مواد بوجود نمی آید. بطور مثال با تغییر درصد وزنی، جرم موثر الکترون از $0.17m_0$ به $0.173m_0$ [۳۱۴] افزایش می یابد که این افزایش جزئی باعث چندانی تغییر بزرگی در خواص رسانش الکتریکی این ماده نمی گردد.

۶-۴- کارهای آینده

با تهیه نرم افزاری که قادر به حل معادله ترابری الکترون‌ها در ترکیبات نیمرسانا است، می‌توان خواص الکتریکی در ماده نیمرسانایی را که دارای گاف انرژی مستقیم است محاسبه نموده و تغییرات این پارامترهای الکتریک را با دما و چگالی الکترون‌های آزاد آنها مقایسه نمود. با استفاده از این نرم افزارها می‌توان اینگونه بررسی را در دیگر ترکیبات نیمرسانا از گروه II، IV جدول تناوبی مانند CdTe، CdSe یا آلیاژهای ترکیبات نیمرسانایی نظیر AlGaAs، AlGaIn و ... انجام داد. همچنین با استفاده از این نرم افزار می‌توان خواص ترابری الکترون‌ها را نه تنها در دره مرکزی Γ ، بلکه در هر دره بالاتر دیگری نیز بررسی نمود. بطور مثال می‌توان خواص ترابری الکترون‌ها را هنگامی که در دومین و یا سومین دره نوار رسانش ترکیبات نیمرسانا قرار می‌گیرند با یکدیگر مقایسه نمود. بررسی چنین مواردی خود نیاز به اطلاعات وسیعی از مشخصات نوارهای انرژی بالاتر، و خواص الکترون‌ها در دره‌های بالاتر انرژی دارد که می‌تواند اساس پژوهش جدید دیگری را تشکیل دهد.

منابع و مراجع:

- ۱- مبانی پراش پرتو X ، تالیف بی . دی . کالیتی، ترجمه دکتر بیژن اعتمادی، دکتر جمشید عمیقین، انتشارات دانشگاه شیراز، ۱۳۷۵
- ۲- شناسایی مواد به کمک اشعه ایکس ، تالیف هارالد کریشنر، ترجمه دکتر عباس طائب، چاپ تهران دانشگاه علم و صنعت ایران، ۱۳۷۰
- ۳- فیزیک حالت جامد ، تالیف علی عمر، ترجمه غلامرضا نبیونی، حسن عزیزی - دانشگاه اراک ۱۳۸۰
- ۴- فیزیک حالت جامد، تالیف روزنبرگ، ترجمه دکتر حسین عشقی، حسن عزیزی - دانشگاه مرکز دانشگاهی تهران، ۱۳۷۶
- ۵- آشنایی با فیزیک حالت جامد، تالیف چارلز کیتل، ترجمه اعظم پور قاضی، مهدی سفا، جمشید عمیقین، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۷۶
- ۶- فیزیک و تکنولوژی قطعات نیمرسانا، تالیف اس . ام . زی، ۱۹۸۵ ، ترجمه غلامحسین سدید عابدی، دانشگاه امام رضا(ع) مشهد، موسسه چاپ و انتشارات آستان قدس رضوی ، ۱۳۷۵
- 7-Rode ,D.L, Electron Transport in InSb , InAs and InP *physical Review B*, PP.3287 –3299,(1971)
- 8-Molestue.c, *Monte Carlo simulation of semiconductor Devices* chapman and Hall, 1993
- 9-Rode,D.L, *SemiConductors and Semimetals*, Academic Press,Vol .50,(1970)
- 10-Ohar . S and Ghosh. S,Electron mobility in GaN *J.Appl. Phys.* Vol .86,Pp.2668 –2675,(1999).
- 11-Goano,M and Bellott, E Band structure nonlocal Pseudopotential... GaN , ALN and InN, *J.APPL. Phys*, Vol.83,No.11,PP.6468-6474,(2000)
- 12-Morkoc, H *Nitride Semiconductor and Devices*,Springer – Verlag (1999)

13-Farahmand, M, *Monte Carlo simulation of Electron Transport in*

III- nitride wurtzite Phase, IEEE Transactions on Electron Devices, Vol.4, No.3. (2001)

14-Anwar, A.F.M Temperature dependant Transport Properties in GaN, $Al_xGa_{1-x}N$ and $In_xGa_{1-x}N$ Semiconductors, *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 48, No. 3, PP. 576,572, (2001)

منابع دیگری که مورد استفاده قرار گرفته اند .

1-Ashcroft, w, Mermin, N.D, Solid State Physics Printed by Holt, Rinehart and winston, 1979.

2- Rode, D.L and Beer, A,C, *Phys . Rev.* B3, PP. 2534 (1991)

3-Crow.G.C, Abram . R.A and Yangthaisong. A, *Semicond. Sci. Technol.* 15,770, (2000).

4- Dhar and S.Ghosh. *J.APPL. Phys.* 86. 2668. (1999)

5- Basic Crystallography, J.J.Rousseau, John wiley sons, 1998.

۶- بلور شناسی با پرتو X ، تالیف ، لئونیدو و آذارف ترجمه دکتر ناصر تجبر، چاپ دانشگاه فردوسی مشهد ، ۱۳۷۱.

۷- برنامه نویسی به زبان فرترن ۷۷، تألیف چارلیس بی، کریتسبرگ، نورمن تی. کارپنتر، ترجمه دکتر سید رضا غلامرضا پناهی ، انتشارات دانشگاه گیلان و موسسه انتشاراتی فاطمی، ۱۳۷۴

Abstract

Temperature and doping dependence of electron mobility in wurzbite $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ structure has been calculated using an iterative technique. The following scattering mechanisms, such as impurity, polar optical phonon, acoustic phonon and piezoelectric scattering are included in the calculation. Ionized impurity scattering has been treated beyond the Born approximation using the phase – shift analysis. It is found that the electron mobility decreases monotonically as the temperature increases from 100 K to 500 K.

The low temperature value of electron mobility in bulk $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ increases significantly with increasing doping concentration. Our iterative results are in fair agreement with other recent calculations obtained using the experimental methods.

low - field transport propertiey
in InGaN structurey

These observations suggest that increasing levels of chain unsaturation may reduce the sensitivity of bilayer order to variations in pressure.

* Supported by NSERC (MRM) and CIHR (KMWK).

MO-POS-82

Characterization Of Anisotropy In Foams: An Ultrasonic Approach*, Hussein Elmeheidi, J.H. Page AND M.G. Scanlon, *University of Maitoba* — We use low frequency ultras waves (50 kHz) to investigate the mechanical properties of anisotropic freeze-dried bread foams that were prepared by applying uniaxial stress to fresh breadcrumb. Longitudinal ultrasonic velocity and amplitude measurements were taken in directions parallel and perpendicular to the compression direction. The velocity was found to decrease as the amount of compression is increased, with the decrease being greater in the parallel direction. The velocity data were interpreted using two theoretical models, one based on static compression of a simplified strut model of foams and the other including the effects of tortuosity on wave propagation through anisotropic media. Both models allowed velocity anisotropy to be directly related to the anisotropy of the foam structure, and give predictions in good overall agreement with the data. The results also allowed us to conclude that there must be a weakening of the cell walls caused by the uniaxial compression in addition to the effects resulting from the anisotropy alone.

* This work is being supported by NSERC.

MO-POS-83

Structure of a Homologue Series of Banana Mesogens Studied By C13 NMR Spectrum*, J. Xu and R.Y. Dong, *University of Manitoba* — C13 NMR spectroscopy was used to obtain the geometrical information in three members of a homologue series of banana molecules, 9CIPBBC, 8DCIPBBC and 9DCIPBBC. The orientational order parameter S bending angles and tilt angles between the biphenyl rings were determined from the temperature dependent chemical shifts in the nematic phases. Although the temperature dependence of S was found to be different for these molecules, the S values at T_c were almost identical. It was also found that tilt angles depend linearly on temperature, an bending angle in the mono-substituted molecule is about 14 degree smaller than the di-substituted molecular. A SUPER (Separation of Undistorted Chemical-Shift Anisotropy Powder Patterns) technique was used to determine the chemical shift tensors of carbons of model compounds (e.g. 4-Chlororesorcinol). These tensorial components are required for fitting the temperature dependent chemical shifts in aligned samples.

* Research is supported by NSERC and Brandon University

MO-POS-84

On the Physical Mechanism of Vortex Stirring in MHD-Driven Two-Fluid Molten Metal Flows, David Munger and A. Vincent, *Université de Montréal* — Magnetohydrodynamic (MHD) instabilities such as those observed in aluminum reduction cells have been thoroughly studied, for instance by means of linear analysis by Sneyd (1992) and numerical simulation by Potocnik (1989) using industrial codes, as well as by Gerbeau (2001) using finite elements. Though its understanding is critical for efficient aluminium production the physical mechanism is still unknown. We focus on the stability of vortex stirring that naturally occurs in MHD-driven systems of two fluids with a large electrical conductivity ratio, traversed by an intense vertical electric current and under a strong background magnetic field. We perform three-dimensional nonstationary numerical simulations of the conservative equations, using a levelset technique to track the position of the interface between the two fluids. Periodic transport of large eddies occurs, in which we observe oscillation of vortex energy arising from a balance between the dissipation forces and the supply from the imposed electric current. The corresponding frequencies are orders of magnitude smaller than those observed in typical metal pad roll, so that long-lasting simulations are necessary to track slowly growing instabilities. We are able to find a stability threshold in terms of the electrical conductivity of the fluids, and we are currently trying to correlate it with the cell's dimensions. We conjecture that an increase of the latter will compensate a decrease of conductivity in the triggering of instabilities. Simulations are underway and results will be presented at the conference.

MO-POS-85

Spin Wave Dispersion of the 2D Hubbard Model at Intermediate Coupling*, Walter Stephan, *Bishop's University* — The spin wave dispersion relation for the 2D square lattice Hubbard model at half-filling is calculated using an "exact" linked cluster expansion method. The approach used is most reliable at strong coupling, but still converges reasonably well when the Coulomb repulsion is of the same order of magnitude as the band width. Results are compared to those of other approximate calculations as well as neutron scattering measurements of undoped cuprates.

* This work is being supported by NSERC.

MO-POS-86

The Giant Magnetocaloric Effect (GMCE) in Ni-Mn-Ga, Wei Li, Xuezhong Zhou, H.P. Kunkel and Gwyn Williams, *University of Manitoba* — Several previous investigations have demonstrated that a giant magnetocaloric effect (GMCE) – a large isothermal entropy / adiabatic temperature change associated with the application of an external magnetic field to a system – is most often linked to the substantial entropy change accompanying a first-order phase change. However, it appeared plausible that in systems exhibiting sequential magnetic transitions – specifically a continuous paramagnetic to ferromagnetic transition followed by a first-order / discontinuous (order-order) transition - this effect might be enhanced if these two transitions could be brought into close proximity, or better still, merged. The veracity of this suggestion has been demonstrated in the Ni-Mn-Ga system where such a coincidence can be achieved through careful compositional tuning, thus for Ni_{55.2}Mn_{18.6}Ga_{26.2} an entropy change of $\Delta S_M = -20.4 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$ is observed at T_c in a field of 5T, one of the larger values measured at or above room temperature.

MO-POS-87

Comparison of Electron Mobility in Zincblende and wurtzite GaInN, A. Somaee², M. Sadeghi², H. Arabshahi¹, M. Ghazi², ¹ Tarbiat Moallem University and ² Shahrood University of Technology, Iran — GaN has received much attention in recent years because of its potential for a wide range of applications in high power and optoelectronic devices. The demands of device designs have encouraged numerical studies of electron transport in the material. In this research a numerical iteration method has been developed and used to model electron transport in zincblende and wurtzite GaInN at low electric fields. Our results show that the electron drift mobility of wurtzite GaInN is lower than that for the zincblende structure at all temperatures. This is largely due to the higher Γ valley effective mass and a higher electron scattering rate in the wurtzite phase.

MO-POS-88

Low-Field Electron Transport Calculations in Bulk Wurtzite GaN Using Iterative Technique, Hadi Arabshahi, *Tarbiat Moallem University* — Temperature and electric field-dependent electron transport in bulk wurtzite GaN structure have been calculated using an iterative technique. The following scattering mechanisms, i.e. impurity, polar optical phonon, piezoelectric and electron plasmon are included in the calculation. Ionized impurity scattering has been treated beyond the Born approximation using the partial shift analysis. The low electron drift mobility is calculated for temperatures in the range of 300-600K and for ionized impurity concentrations between 10^{16} and 10^{18} cm^{-3} . The temperature value of electron mobility increases significantly with increasing doping concentration. The iterative results are in fair agreement with other recent calculations obtained using the relaxation-time approximation and experimental methods. Compensation effects on the mobility are also examined. Due to the freezeout of deep donor levels the role of ionized impurity scattering in bulk wurtzite GaN is suppressed and the role of phonon scattering is enhanced, compared to zincblende structure. Electron transport properties have been modelled with an electric field applied both parallel and perpendicular to the (0001)-axis. The extracted model parameters can be used for electron transport simulations in GaN-based transistors.

MO-POS-89

Design and Modelling of Inductively Heated Substrate Holders for Advanced Plasma Materials Processing Applications*, Ajay K. Singh and Michael P. Bradley, *University of Saskatchewan* — Plasma processing of materials will be one of the key enablers for advances in electronics and photonics technology in the 21st century. Effective plasma materials processing requires careful control of process parameters, including the temperature of the target material. For example, a minimum target temperature ~ 800 Cels required for plasma deposition of diamond films. Unfortunately, in high pressure (~ 10 Torr) microwave plasma systems (such as the diamond film growth system at the University of Saskatchewan) the ultimate target temperature may be limited to ~ 500 Celsius because ion-neutral collisions limit the amount of heat delivered to the target, and because relatively high convective cooling rates. Thus it is necessary to directly heat the target to achieve the high temperatures required. Direct heating via heating wire may be difficult to implement because in most cases the substrate must be biased with respect to the grounded chamber walls to achieve good film growth. Inductive eddy current heating provides a solution. Heating energy is efficiently coupled into the substrate via induced eddy currents, providing rapid and potentially highly uniform heating. The purely inductive coupling means that the substrate can be biased to arbitrary voltages as required. This presentation will discuss our design efforts on heated substrate holders. We will present results of thermal modelling calculations (i.e. heating curves, mean temperature, temperature uniformity) and will discuss their implications for advanced target holder design.

* This work is being supported by NSERC.

MO-POS-90

Elastic Fields from Reconstructed Terraces of a Semi-Infinite Solid*, R. Arief Budiman, *University of Calgary* — Two-dimensional problem of a semi-infinite solid with surface reconstruction boundary condition is considered. Surface reconstruction produces sinusoidal displacement fields on a terrace and attractive interaction due to the reconstructed surface.

CANADIAN ASSOCIATION
OF PHYSICISTS



ASSOCIATION CANADIENNE
DES PHYSIENS ET PHYSIENNES

Suite.Bur. 112, Imm. McDonald Bldg., Univ. of / d'Ottawa, 150 Louis Pasteur, Ottawa, Ontario, Canada K1N 6N5
Tel. / Tél. : (613) 562-5614; Fax / Téléc. : (613) 562-5615; E-mail / Courriel : cap@physics.uottawa.ca

2004 April 29

Dear Mr. Somace:

2004 CAP Annual Congress
June 13-17, Winnipeg, Manitoba

Thank you for your submitted abstract entitled "Comparison of Electron Mobility in Zincblende and wurtzite GaInN ". I am pleased to advise you that your abstract has been selected by the chair of the Condensed Matter and Materials Division as a poster during the plenary Beer and Poster Session on Monday evening, June 14th.

Your poster will be included in the DCMMP poster session as poster number **MO-POS-124**. Instructions for the preparation and display of posters are attached. As noted above, this year we are holding the poster session as an evening plenary starting at 19h00 on June 14th.

You or a co-author (if applicable) of the abstract must be available at your poster between 19h00 and 21h00 on the 14th. The posters can be mounted any time after noon on June 13th and left mounted until noon on Wednesday, June 16th.

A copy of the Congress program will be mailed to all 2004 CAP Congress delegates by mid-May. Please ensure that the mailing address at the top of this letter is correct, and forward any changes to the CAP office no later than May 15th. In the meantime, please feel free to check the CAP's website (<http://www.cap.ca>) which is being updated on a regular basis to include the most recent Congress Program available.

Register before May 1st for discounted rates!

If you have any questions regarding any of the above or require Congress registration information, please feel free to contact me at (613) 562-5614. Otherwise, I will look forward to seeing you at the Congress.

Yours sincerely,


Carmen Harvey
Administrative Assistant