

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری



دانشگاه علوم پایه دامن

دانشکده فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

(گرایش حالت جامد)

مطالعه خواص ترابری الکتریکی نیمرساناهای نیتروژندار رقیق

AlGaNaNs و InGaNaNs ، GaNaNs

استاد راهنما:

دکتر حسین عشقی

(عضو هیأت علمی دانشگاه صنعتی شاهرود)

نگارش:

محسن عامری

در دهه‌ی ۹۰ میلادی گزارشات متعددی مبتنی بر اندازه‌گیری و مطالعه‌ی خواص ترابری الکتریکی نیم‌رساناهای نیتروژندار رقیق شامل ترکیبات GaN_xAs_{1-x} ، $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ و ... (به ازای کسر مولی $x < 5\%$) ارائه شده‌اند. وجود اتمهای N به مقدار کم در شبکه‌ی بلوری این مواد برخلاف سایر نیم‌رساناهای آلیاژی، به طور غیر عادی منجر به کاهش قابل توجهی در گاف نواری گردیده است.

هدف ما در این رساله بررسی خواص ترابری الکتریکی (تراکم و تحرک حاملهای بار) در نمونه‌های $GaNAs$ ، $InGaNA$ و $AlGaNA$ بدون آرایش خواسته است که غالباً به روش MBE رشد یافته‌اند.

بررسیهای نظری مربوط به وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه‌های مختلف حاکی از آن است که: (الف) سازوکارهای پراکندگی آلیاژ کتره‌ای و بخصوص آلیاژ خوشه‌ای نقش غالب را در کاهش تحرک الکترونی ایفا می‌کنند که دلیل این امر تشکیل خوشه‌های نیتروژنی در داخل ماده می‌باشد. (ب) اینکه افزایش کسر مولی نیتروژن در شبکه سبب کاهش تراکم الکترونی می‌گردد می‌تواند حاصل تشکیل تراکم بیشتری از ترازهای به دام اندازنده‌ی مربوط به ترازهای اتمهای N در ماده باشد. (ج) علت بهبود کیفیت بلوری ترکیبات چهارتایی $In(Al)GaNAs$ در مقایسه با ترکیب سه‌تایی $GaNAs$ می‌تواند متأثر از تضعیف پراکندگیهای آلیاژ خوشه‌ای و همچنین دررفتگی‌های بلوری در ماده باشد.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	فصل اول: مروری بر مقالات
۷	مراجع
۹	فصل دوم: بررسی ساختار نواری در آلیاژهای نیتروژندار رقیق <i>AlGaNaNs</i> و <i>InGaNaNs</i> ، <i>GaNaNs</i>
۱۰	۱-۲- بررسی گاف نواری
۱۴	۲-۲- ساختار نواری در نیمرساناهای نیتروژندار رقیق، مدل برهمکنش تقاطع نواری (<i>BAC</i>) و مدل <i>k.p</i>
۱۷	۲-۳- جرم مؤثر الکترون
۲۱	مراجع
۲۳	فصل سوم: نظریه‌ی ترابری حاملها در میدان ضعیف در ترکیبات نیتروژندار رقیق <i>AlGaNaNs</i> و <i>InGaNaNs</i> ، <i>GaNaNs</i>
۲۴	۱-۳- نظریه‌ی پراکندگی و سازوکارهای مؤثر در تحرک
۲۶	۳-۱-۱- پراکندگی ناخالصی یونیده
۲۷	۳-۱-۲- پراکندگی پیزو الکترونیک
۲۷	۳-۱-۳- پراکندگی فونونی آکوستیک
۲۷	۳-۱-۴- پراکندگی فونونی قطبی - نوری
۲۸	۳-۱-۵- پراکندگی ناخالصی‌های خنثی

۲۸	۳-۱-۶- پراکندگی از دررفتگی های بلوری
۲۹	۳-۱-۷- پراکندگی آلیاژ کترهای
۳۰	۳-۱-۸- پراکندگی آلیاژ خوشه‌ای
۳۱	۳-۲- تعیین تراکم و نوع حاملهای بار
۳۲	۳-۲-۱- مروری بر مبانی نظری تراکم حاملها در نیمرساناها
۳۳	۳-۲-۲- نحوه‌ی توزیع آماری بار در نیمرسانا
۳۴	۳-۲-۳- تراکم الکترون و حفره در تعادل گرمایی در یک نیمرسانای ذاتی
۳۵	۳-۲-۴- اثر آرایش بر توزیع تعادلی الکترونها و حفره‌ها
۳۸	۳-۲-۵- معادلات مربوط به خنثایی بار و تراکم الکترونها و حفره‌ها
۴۰	مراجع
۴۱	فصل چهارم: بررسی نظری داده‌های تجربی
	۴-۱- بستگی تراکم الکترونی در مواد نیتروژندار رقیق $GaNAs$ و $InGaNaNs$ به مقدار کسر مولی نیتروژن (x) در دمای اتاق
۴۲	
۴۷	۴-۲- بررسی وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه‌های $GaNAs$ ، $InGaNaNs$ و $AlGaNaNs$
	۴-۲-۱- تأثیر نیتروژن بر تحرک الکترونی در نمونه‌های $GaNAs$ با مقدار نیتروژن متفاوت
۵۲	۴-۲-۲- تأثیر حضور ایندیوم بر تحرک الکترونی در $GaNAs$ (نمونه‌های $InGaNaNs$)
۵۸	۴-۲-۳- تأثیر حضور آلومینیوم بر تحرک الکترونی در $GaNAs$ (نمونه‌های $AlGaNaNs$)
۶۳	نتیجه گیری
۶۵	مراجع

فهرست اشکال

- شکل ۱-۲- نمایش تغییرات گاف نواری بر حسب ثابت شبکه‌ای برای برخی از نیمرساناها و آلیاژهای وابسته به آنها ۱۳
- شکل ۲-۲- گاف نواری بر حسب ثابت شبکه‌ای برای InGaAs ، GaNAs ، InGaAs رشد یافته بر روی زیر لایه‌ی GaAs ۱۳
- شکل ۳-۲- نمایش شکافتگی نوار رسانش مربوط به پیش بینی مدل BAC در $\text{In}_{0.04}\text{Ga}_{0.01}\text{As}$ (ب) و $\text{Ga}_{0.005}\text{As}$ (الف) ۱۵
- شکل ۴-۲- تطابق مدل BAC (خطوط توپر) با داده‌های تجربی مربوط به تغییرات گاف نواری بر حسب ترکیب نیتروژن در (الف) GaNAs (ب) InGaNAs با زیر لایه‌های GaAs و InP ۱۷
- شکل ۵-۲- تغییرات جرم مؤثر در GaNAs بر حسب گاف نواری ۱۸
- شکل ۶-۲- مقایسه‌ی پیش بینی‌های مدل BAC و $k.p$ در زمینه‌ی جرم مؤثر ترکیب GaNAs ۱۹
- شکل ۷-۲- جرم مؤثر الکترون بر حسب بردار موج فرمی در ۲۰

آلیاژ GaAs و InGaNaS

- ۳۰ شکل ۳-۱- وابستگی دمایی تحرک الکترونی محاسبه شده‌ی نظری در نیمرسانای نیتروژندار رقیق GaN_xAs با x های متغیر
- ۳۱ شکل ۳-۲- مقادیر نظری تحرک الکترونی حاصل از پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای (خط چین) و کتره‌ای (خط توپر) در GaNaS بر حسب کسر مولی N
- ۳۲ شکل ۳-۳- نمایش نمونه‌ی در معرض اندازه‌گیری هال با اعمال جریان
- ۳۶ شکل ۳-۴- تابع چگالی حالت، تابع احتمال فرمی - دیراک و نواحی تراکم الکترون و حفره وقتی که تراز فرمی بالاتر از وسط گاف نواری قرار دارد.
- ۳۷ شکل ۳-۵- تابع چگالی حالت، تابع احتمال فرمی - دیراک و نمایش نواحی تراکم الکترون و حفره وقتی که تراز فرمی پایینتر از وسط گاف نواری قرار دارد.
- ۳۸ شکل ۳-۶- انتگرال فرمی - دیراک $f_{1/2}$ به صورت تابعی از انرژی فرمی
- ۴۳ شکل ۴-۱- تغییرات تراکم حاملها در نمونه‌های GaNaS و InGaNaS
- ۴۶ شکل ۴-۲- نمودار مربوط به تغییرات تراکم تله‌های الکترونی در نمونه‌های فلک و آدامسیک
- ۴۷ شکل ۴-۳- داده‌های تجربی نمونه‌های GaNaS و GaAs مربوط به (الف): سوزوکی و (ب): هاشیموتو
- ۵۰ شکل ۴-۴- نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه‌ی $\text{GaN}_{0.008}\text{As}_{0.992}$ سوزوکی و همکاران
- ۵۱ شکل ۴-۵- نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه‌ی $\text{GaN}_{0.014}\text{As}_{0.986}$ هاشیموتو و همکاران
- ۵۲ شکل ۴-۶- نمایش داده‌های تجربی تحرک الکترونی مربوط به نمونه‌های سوزوکی

شکل ۴-۷- نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تحرک الکترونی در

۵۴

نمونه‌های (الف) $\text{In}_{0.03}\text{Ga}_{0.97}\text{N}_{0.008}\text{As}_{0.992}$ و (ب) $\text{In}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}_{0.008}\text{As}_{0.992}$

شکل ۴-۸- نمودار تغییرات تراکم دررفتگی‌ها با درصد ایندیوم

۵۵

شکل ۴-۹- بررسی نظری سوزوکی در نمونه‌ی (الف) بدون In (ب) با In

۵۸

شکل ۴-۱۰- طرحی ساده از توزیع نیتروژن در (الف) نمونه‌ی بدون In

۵۷

(ب) نمونه‌ی با In

شکل ۴-۱۱- نمایش داده‌های تحرک الکترونی مربوط به نمونه‌های

۵۸

GaNAs, AlGaAs, GaNAs و AlGaAs (هاشیموتو و همکاران)

شکل ۴-۱۲- نمایش نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تحرک الکترونی

۶۰

در $\text{Al}_{0.17}\text{Ga}_{0.83}\text{N}_{0.013}\text{As}_{0.987}$ (نمونه‌ی هاشیموتو)

شکل ۴-۱۳- پراکندگی مربوط به اتم نیتروژن (نمودار مثلث توخالی)

۶۱

در (الف) AlGaAs و AlGaAs و (ب) در GaAs و GaNAs

فهرست جداول

جدول ۲-۱- مقادیر پارامتر خمشی گاف نواری نیمرساناهای آلیاژی سه‌تایی

۱۲

جدول ۲-۲- پارامترهای مدل BAC مربوط به بعضی از نیمرساناهای نیتروژندار رقیق

۱۶

جدول ۴-۱- محاسبات مربوط به تراکم تله‌ها در نمونه‌های آدامسیک

۴۵

جدول ۴-۲- محاسبات مربوط به تراکم تله‌ها در نمونه‌های فلک

۴۵

جدول ۴-۳- پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه GaNAs سوزوکی و همکاران

۴۹

جدول ۴-۴- پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه $\text{Ga}_{0.014}\text{As}_{0.986}$

۵۱

جدول ۴-۵- پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه‌های InGaAs

۵۳

سوزوکی و همکاران

هاشیموتو و همکاران

فصل اول

مروری بر مقالات

مقدمه

نیمرساناها از جمله ترکیباتی هستند که نقش غیر قابل انکاری در پیشرفت‌های سه دهه‌ی اخیر داشته‌اند. از کاربردهای این نیمرساناها می‌توان به حسگرها، قطعات حالت جامد نورافشان^۱، نظیر دیودهای نورگسیل^۲ و دیود لیزری، و همچنین در تصویر برداری پزشکی اشاره نمود. مهمترین ترکیب شناخته شده در زمینه‌ی نیمرساناها مرکب^۳ $GaAs$ می‌باشد که با دارا بودن مشخصات منحصر بفرد در ساختار الکترونی^۴، مانند: گاف نواری مستقیم^۵، در مقایسه با نیمرساناهاى عنصرى از قبیل Si و Ge از بازدهی نوری بالاتری برخوردار می‌باشد. از دیگر ویژگیهای این ماده، بالا بودن تحرک^۶ الکترونی است که نقش مهمی در ساخت ترانزیستورهای پر سرعت ایفا می‌کند. علاوه بر خصوصیات ذاتی یادشده می‌توان به قابلیت آلیاژی شدن آن با عناصر گروه III مانند In و Al و گروه V مانند P و Sb اشاره نمود که این خاصیت می‌تواند در کنترل گاف انرژی ماده‌ی آلیاژی حاصل شده مورد استفاده قرار گیرد. می‌دانیم که اکثر نیمرساناهاى ترکیبی $III-V$ دارای ساختار بلوری مکعبی زینک بلند^۷ بوده و به هنگام آلیاژ شدن، گاف انرژی آنها تغییر می‌یابد[۱].

در اوایل دهه‌ی ۹۰ میلادی افزودن عناصر دیگری از گروه V به ترکیب $GaAs$ نتایج جالب دیگری را به دنبال داشت. از مهمترین این عناصر می‌توان به نیتروژن (N) اشاره کرد. گزارشات تجربی[۲و۳] در این زمینه بیانگر کاهش قابل ملاحظه‌ی گاف نواری برای این ترکیبات با اضافه شدن کسر مولی (x) کمتر از ۴٪ به ترکیب $GaAs$ (تشکیل آلیاژ GaN_xAs_{1-x}) می‌باشد که

-
- 1- Solid state light emitting devices
 - 2- Light Emitting Diodes
 - 3- Compound semiconductors
 - 4- Electronic structure
 - 5- Direct band gap
 - 6- Mobility
 - 7- Zinc-blend

رفتاری متفاوت با آلیاژهای معمول دارد. امروزه به این ترکیبات نیمرسانای جدید، نیمرساناهای نیتروژندار رقیق^۱ گفته می‌شود. این نیمرساناها که بصورت کلی $III-V-N$ نمایش داده می‌شوند، می‌توانند در ترکیب آلیاژهای سه‌تایی^۲ مانند: GaN_xAs_{1-x} ، GaN_xP_{1-x} و چهارتایی^۳ مانند: $In_yGa_{1-y}N_xP_{1-x}$ ، $Al_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ ، $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ ساختار این مواد می‌تواند به صورت کپه‌ای (حجمی) و یا دو بعدی (چاه کوانتومی) باشد. اضافه شدن نیتروژن به میزان کم می‌تواند رفتارهای غیر طبیعی مانند: بزرگی قابل توجه پارامتر خمشی^۴ در گاف نواری، افزایش جرم مؤثر و کاهش تراکم و تحرک الکترونی را به دنبال داشته باشد. در ادامه مروری بر مقالات و گزارشات مربوط به روشهای رشد، ساختار نواری و خواص ترابری الکتریکی^۵ آلیاژهای GaN_xAs_{1-x} ، $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ و $Al_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ خواهیم داشت.

نیمرسانای GaN_xAs_{1-x} :

در رشد این لایه‌ی سه‌تایی، معمولاً از روشهای مختلف مانند: MBE ^۶ مشتمل بر $GSMBE$ ^۷ و $Radio\ frequency-MBE$ استفاده می‌شود. این لایه‌ها معمولاً بر روی زیرلایه‌های $GaAs$ ، Si و GaP در دمای پایین‌تر نسبت به لایه‌ی $GaAs$ روآراستی^۸ رشد داده می‌شوند [۴-۶ و ۱۰]. معمولاً لایه‌های بدون آرایش از خود رسانندگی نوع n نشان می‌دهند [۴ و ۷] اما در موارد معدودی رسانش نوع p نیز مشاهده شده است [۸]. معمولاً در این ماده برای دستیابی به آرایش نوع p و n به ترتیب از اتمهای Be و Si به عنوان آلاینده استفاده می‌شود [۹ و ۱۰].

با توجه به اندازه‌گیریهای نوری انجام شده، آلیاژ GaN_xAs_{1-x} دارای گاف نواری مستقیم می‌باشد [۱۱، ۱۲ و ۱۳]، اما بنا به گزارش گودیم و همکاران [۱۳]، هنگامی که میزان کسر مولی N از $x=2/55\%$ بیشتر می‌شود گاف نواری به صورت غیر مستقیم در می‌آید. تغییرات در گاف نواری

-
- 1- Dilute Nitride semiconductors
 - 2- Ternary
 - 3- Quaternary
 - 4- Bowing parameter
 - 5- Electrical transport properties
 - 6- Molecular Beam Epitaxy
 - 7- Gas source- Molecular Beam Epitaxy
 - 8- Epitaxial

نیمرساناهای نیتروژندار رقیق $III - N - V$ بر خلاف دیگر نیمرساناهای ترکیبی $III - As$ با یک خمش بزرگ همراه است که ناشی از تفاوت قابل ملاحظه به لحاظ الکترو نگاتیوی نیتروژن با اتمهای As است. نیمرساناهای معمول دارای پارامتر خمش در حدود 1 eV هستند در حالی که مقدار آن در مورد GaN_xAs_{1-x} بین ۱۶ تا ۲۶ الکترون ولت بوده و وابستگی زیادی به مقدار نیتروژن دارد [۱۴-۱۶]. این رفتارهای غیر عادی بخوبی توسط نظریه BAC ^۱ توضیح داده می‌شوند.

مطابق این نظریه که توسط شان و همکارانش [۱۷] توسعه یافته، با افزودن نیتروژن نوار رسانش $GaAs$ به دو زیر نوار غیر سهمی شکافته می‌شود [۱۸]. وجود نیتروژن در شبکه‌ی بلوری $GaAs$ موجب اختلال در نوار رسانش شده و همین می‌تواند سبب تغییر جرم مؤثر الکترون (m^*) گردد [۱۴]. در نیمرساناهای معمول با کاهش گاف نواری، جرم مؤثر الکترون نیز کاهش می‌یابد [۱۹] و این در حالیست که با اضافه شدن ۱٪ نیتروژن در $GaAs$ ، جرم مؤثر الکترون از $0.067 m_0$ به $0.1 m_0$ افزایش می‌یابد [۲۰]. علاوه بر نظریه BAC نظریه‌ی دیگری موسوم به $k.p$ نیز افزایش جرم مؤثر الکترون را با اضافه شدن نیتروژن پیش بینی می‌کند [۱۴]. بدین ترتیب ورود نیتروژن به شبکه‌ی $GaAs$ نه تنها بر گاف نواری و جرم مؤثر الکترون اثر می‌گذارد، بلکه می‌تواند سبب تغییرات زیادی در خواص ترابری الکتریکی نیمرسانا نیز گردد. در این حالت تحرک الکترونی که کمیتی وابسته به جرم مؤثر الکترون و زمان آزاد میانگین^۲ است، و این خود تابع سازوکارهای پراکندگی^۳ می‌باشد، از مقدار $900-1100\text{ cm}^2/\text{V.s}$ در $GaAs$ پایه (بدون نیتروژن) به $200-400\text{ cm}^2/\text{V.s}$ (با نیتروژن) کاهش می‌یابد که غالباً علت این امر به پراکندگی آلیاژی کتره-ای و پراکندگی مربوط به خوشه‌های نیتروژنی^۴ نسبت داده می‌شود [۷۴]. گزارشات واگنر و همکاران [۲۱] حاکی از توزیع غیر یکنواخت اتمهای نیتروژن در نمونه‌ی GaN_xAs_{1-x} می‌باشند که این امر می‌تواند سبب ایجاد کرنشهایی در لایه گردد.

1- Band anticrossing
2- Mean free-time
3- Scattering mechanisms
4- Nitrogen Clusters

اندازه‌گیری‌های تجربی مربوط به تراکم الکترونی^۱ در این ماده در دمای اتاق نیز نشانگر کاهش تراکم الکترونی با افزایش چگالی نیتروژن می‌باشد [۲۲]. همچنین اندازه‌گیری‌های وابسته به دما اکثراً^۲ نشانگر ثابت ماندن تراکم الکترونی در بازه‌ی دمایی ۷۷ تا ۳۰۰ K هستند [۲۳].

نیمرساناهای $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ و $Al_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$:

در رشد لایه‌های چهارتایی نیتروژندار رقیق نیز از همان روشهای مرسوم در آلیاژ سه‌تایی GaN_xAs_{1-x} استفاده می‌شود. البته روشهای وابسته به MBE مانند: $RF-MBE$ ، $Plasma-assisted-MBE$ و $GS-MBE$ مرسوم‌تر از سایر روشها به نظر می‌آیند. بعد از رشد $GaAs$ پایه، ایندیوم و آلومینیوم را به آن وارد می‌کنند. در ادامه‌ی روند رشد، با کاهش دمای زیر لایه، شرایط برای ورود نیتروژن به لایه‌ی $In_yGa_{1-y}As$ مهیا می‌گردد. این کاهش دما باعث پایین آمدن کیفیت بلوری در $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ می‌گردد [۴، ۵ و ۷]. لازم به ذکر است که در فرایند رشد $Al_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ دمای زیر لایه به هنگام رشد نسبت به دو نمونه‌ی دیگر بزرگتر است [۴]. به هنگام رشد $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ و $Al_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ بر روی زیر لایه‌های Ge ، $GaAs$ و InP ایجاد انطباق شبکه‌ای^۲ با این زیر لایه‌ها و همچنین ثابت نگه داشتن گاف انرژی (۱ eV)، معمولاً نسبت $y \approx 3x$ رعایت می‌گردد [۴، ۵، ۱۴، ۲۴، ۲۵، ۲۶ و ۲۸].

از مشخصه‌های رشد $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ به روش $MOVPE$ اینکه با افزایش میزان ایندیوم، امکان حضور مقدار نیتروژن، در لایه کاهش می‌یابد. برای مثال بنا به گزارش تایون [۳۳]، با ورود ایندیوم به میزان $y = 10\%$ و $y = 30\%$ ، میزان ترکیب نیتروژن به ترتیب از $x = 1\%$ به $x = 0.1\%$ و از $x = 2/5\%$ به $x = 0.8\%$ کاهش می‌یابد. نکته‌ی قابل توجه دیگر در این ترکیب آنکه با افزایش دمای رشد از امکان حضور نیتروژن در لایه‌ی مورد نظر کاسته می‌شود [۳۳].

لازم به توجه است که در ترکیبات $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ در صورتی که $y \leq 10\%$ باشد، به جز گاف نواری و جرم مؤثر حاملها، تفاوت چندانی بین ثابتهای مادی (ثابت دی‌الکتریک فرکانس بالا و پایین، چگالی جرمی و ...) این ماده و GaN_xAs_{1-x} مشاهده نشده است [۲۷].

1- Electron concentration

2- Lattice-matched

ورود نیتروژن به شبکه‌ی بلوری $Al_yGa_{1-y}As$ و $In_yGa_{1-y}As$ تحرک الکترونی را به شدت کاهش می‌دهد به طوری که مقدار آن از گستره‌ی $800-1000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ در $Al_yGa_{1-y}As$ و $In_yGa_{1-y}As$ به گستره‌ی $250-400 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ در $Al_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ و $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ کاهش می‌یابد [۵، ۸]. تنها در یک نمونه‌ی آلاینده‌ی^۱ $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ رشد یافته به روش $RF-MBE$ ، تحرک الکترونی با اندکی اختلاف کمتر از مقدار آن در GaN_xAs_{1-x} مشاهده شده است [۵]. با توجه به داده‌های تجربی گزارش شده، تفاوت اصلی میان این سه ترکیب نیتروژندار رقیق در رفتار دمای پایین تحرک الکترونی است که با ورود ایندیوم و یا آلومینیوم به GaN_xAs_{1-x} بهبود می‌یابد [۷، ۴]. علت بالاتر بودن تحرک در نمونه‌های ایندیوم و آلومینیوم‌دار وجود پیوندهای $In-N$ و $Al-N$ می‌باشد که موجب کاهش تنشهای درونی نمونه می‌گردند [۲۱]. تراکم الکترونی نیز در نمونه‌ی $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ با افزایش میزان ترکیب نیتروژن کاهش می‌یابد که دلیل این امر به تشکیل ترازهای تله‌ای^۲ وابسته به اتمهای نیتروژن نسبت داده می‌شود [۳۰-۳۲].

۱- Doped
2- Trap levels

- [1]- E. Co. Young, " GaNAs and GaAsBi: structural and electronic properties of two resonant state semiconductor alloys ", PhD thesis, University of British Columbia (2006).
- [2]- M. Weyers, M. Sato, H. Ando, Jpn. J. Appl. Phys **31**: L 583 (1992).
- [3]- M. Kondow, *et al.* Jpn. J. Appl. Phys **33**: L 1056-L 1058 (1994).
- [4]- A. Hashimoto, T. Yamaguchi, T. Suzuki, A. Yamamoto, " Hall electron mobility versus N-Spatial distribution in III-V-N Systems ", J. Cryst. Growth. **278**, 532-537 (2005).
- [5]- Yukiko Shimizu, *et al.* " Effect of Growth temperature on the properties of Ga(In)NAs thin films by atomic hydrogen-assisted RF-MBE ", J. Cryst. Growth. **278**, **301** 579-582 (2007).
- [6]- J. Salzman, H. Temkin, " III-N-V compounds for infrared application ", Material Science and Engineering B50, 148 (1997).
- [7]- T. Suzuki, T. Yamaguchi, " Electric properties of RF-MBE InGaNAs Grown layer ", Phys. Stat. sol(b), No. 7. 2769-2772 (2003).
- [8]- J. F. Geisz, D. J. Friedman, " Photocurrent of 1eV InGaNAs lattice-matched to GaAs ", J. Cryst. Growth. **195** 401-408 (1998).
- [9]- E. Strom, " OPTICAL AND ELECTRICAL PROPERTIES OF DILUTE GaN_xAs_{1-x} ALLOYS ", Master of Science thesis, University of British Columbia (2002).
- [10]- C. W. T, W. M. Chen, I. A. Buyanova, J. Cryst. Growth. **288**, 7 (2006).
- [11]- W. G. Bi, C. W. Tu, " Bowing parameter of the band-gap energy of GaNAs ", Appl. Phys. Lett. **70**, 1608 (1997).
- [12]- M. Sato, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **395**, 285 (1996).
- [13]- A. Gueddim, *et al.* Journal of Physics and Chemistry of Solid **67**, 1618 (2006).
- [14]- I. A. Buyanova, W. M. Chen, " Physics and Application of dilute nitrides ", Taylor & Francis Books Inc (2004).
- [15]- P. R. C. Kent, A. Zunger, Phys. Rev. B. **64**, 115208 (2001).
- [16]- I. A. Buyanova, W. M. Chen, B. Monemar, " Electronic properties of Ga(In)AsN alloys ", MRS Internet J. Nitride semscond. Res. 6, 2 (2001).
- [17]- W. Shan, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **82**, 1221 (1999).
- [18]- W. Walukiewicz, " Narrow band gap group III-Nitride alloys ", Physica E **20**, 300-307 (2003).
- [19]- N. Balken, IEE Proc. Optoelectron, **150**, No. 1 (2003).

- [20]- C. Skierbiszewski, *et al.*, " Effective mass and conduction band dispersion of GaNAs/GaAs quantum wells ", *Physica E* **13**, 1078-1081 (2004).
- [21]- J. Wagner, *et al.*, *Solid-state Electron.* **47**, 461 (2003).
- [22]- M. Adamcyk, " Epitaxial growth of dilute-nitride- arsenide compound semiconductors by MBE ", PhD thesis, University of British Columbia (2002).
- [23]- F. Ishikawa, E. Mussler, " Impact on N-induced potential fluctuations on the electron transport in Ga(AsN) ", *Appl. Phys. Lett.* **87**, 262112 (2005).
- [24]- K. Volz, J. Koch, B. Kunert, W. Stolz, " Doping behaviour of Si, Te, Zn and Mg in lattice-matched (GaIn)(NAs)/GaAs Bulk films ", *J. Cryst. Growth.* **284**, 451-456 (2003).
- [25]- Y. Shimizu, N. Kobayashi, *J. Cryst. Growth.* **278**, 553 (2005).
- [26]- L. Bellaiche, A. Zunger, " Effects of Short range order on the electronic and optical properties of GaNAs, GaInN and GaInAs alloys ", *Phys. Rev. B.* **57**: 4425-4431 (1998).
- [27]- I. Vurgaftman, J. R. Meyer, *J. Appl. Phys.* **89**: 5815 (2001).
- [28]- L. Bellaiche, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 2578 (1999).
- [29]- A. Al-Yacoub and L. Bellaiche, *Phys. Rev. B.* **62**: 10847 (2000).
- [30]- Wei Li and Markus Pess, " Doping and carrier transport in $\text{Ga}_{1-3x}\text{In}_{3x}\text{N}_x\text{As}_{1-x}$ alloys ", *Phys. Rev. B.* **64**, 113308 (2003).
- [31]- A. Fleck, B. J. Robinson, " Characterization of defects in doped InGaNAs grown by Molecular-Beam Epitaxy ", *Appl. Phys. Lett.* **78**: 1694-1696 (2001).
- [32]- S. Ahmed, *et al.* *Nuclear Instruments and methods in Physics Research B* **240** 214-218 (2005).
- [33]- J. Toivonen, " Growth and properties of GaNAs structures ", PhD Thesis, Helsinki University of Technology, (2003).

فصل دوم

بررسی ساختار نواری در آلیاژهای

نیتروژندار رقیق

AlGaNA_s و InGaNA_s، GaNA_s

ترکیبات $III-N-V$ زیر مجموعه‌ای از نیمرساناهای آلیاژی $III-V$ هستند که با ورود مقدار ناچیزی نیتروژن (کمتر از کسر مولی ۲ درصد) بعنوان ناخالصی به ساختار شبکه‌ی نیمرسانای میزبان (GaP , $GaAs$ و ...)، ترازهای الکترونی مربوط به اتمهای نیتروژن با ترازهای حاضر در نوار رسانش نیمرسانای میزبان^۱، حالت تشدید پیدا کرده و سبب خمش نوار رسانش می‌گردند. این امر که به کاهش گاف نواری ماده می‌انجامد منجر به تغییراتی در برخی از خواص الکترونیکی نیمرسانا از جمله جرم مؤثر حاملی در آن می‌شود. هدف ما در این فصل بررسی گزارشات تجربی و مطالعات نظری انجام شده در زمینه‌ی ساختار نواری، گاف نواری و جرم مؤثر الکترون در پیرامون این ترکیبات می‌باشد.

۲-۱- بررسی گاف نواری

با ترکیب دو یا چند نیمرسانا با یکدیگر این امکان به وجود می‌آید تا بتوان یک نیمرسانای آلیاژی تهیه نمود. با این روش می‌توان گاف نواری ماده‌ی حاصل شده را که خواص الکتریکی و نوری نیمرساناها به آن وابسته است، تحت کنترل درآورد. در برخی از ترکیبات سه‌تایی و چهارتایی، پارامترهای فیزیکی آن به صورت خطی با پارامترهای مربوط به ترکیبات دوتایی پایه آنها ارتباط دارند.

در حالت کلی پارامتر Q در یک ترکیب چهارتایی $A_x B_{1-x} C_y D_{1-y}$ را می‌توان بصورت زیر نوشت [۱]:

$$Q'_{ABCD}(x, y) = \frac{x(1-x)[(1-y)Q_{ABD}(x) + yQ_{ABC}(x)] + y(y-1)[xQ_{ACD}(y) + (1-x)Q_{BCD}(y)]}{x(1-x) + y(1-y)} \quad (1-2)$$

1- Host semiconductor

به طوری که پارامترهای وابسته به ترکیبات سه تایی $A_{1-x}B_xC$ خود از جمع ترکیبات دوتایی تشکیل دهنده ی آنها بدست می آیند.

$$Q_{ABC}(x) = (1-x)Q_{AC} + xQ_{BC} - x(1-x)C_{ABC} \quad (2-2)$$

که Q_{AC} و Q_{BC} مقادیر پارامتر مورد نظر در ترکیبات دوتایی و C_{ABC} ضریب خمشی مربوط به آن می باشد. به عنوان مثال برای محاسبه ی گاف نواری در GaN_xAs_{1-x} ، داریم:

$$E_g(GaN_xAs_{1-x}) = xE_g(GaN) + (1-x)E_g(GaAs) - bx(1-x) \quad (3-2)$$

که در آن ضریب b همان پارامتر خمشی است [۲-۵]. این ضریب که معیاری از غیر خطی بودن تغییرات گاف نواری بر حسب x می باشد، در بسیاری از آلیاژهای سه تایی مقداری ثابت و در حدود 1 eV است اما در مورد ترکیب نیتروژندار رقیق GaN_xAs_{1-x} بخصوص در شرایط $(x < 1\%)$ ، مقدار این پارامتر بسیار بزرگ (تقریباً 26 eV) و شدیداً وابسته به x می باشد (جدول ۲-۱) [۶و۲].

علت بزرگی بیش از حد معمول پارامتر b در این نیمرسانا آن است که در نمونه های رشد داده شده، غالباً اتمهای نیتروژن توزیعی غیر یکنواخت داشته و به صورت تجمعهای خوشه ای در آلیاژها شکل می گیرند. بدیهی است که در یک توزیع یکنواخت، انتظار شکل گیری آلیاژ کتره ای GaN_xAs_{1-x} می رود. این موضوع به معنی آن است که در اطراف اتمهای Ga با احتمال $x\%$ اتمهای نیتروژن و به احتمال $(1-x)\%$ اتمهای As وجود دارند. اما همواره چنین اتفاقی نمی افتد و معمولاً مقداری بی-نظمی در قرار گیری اتمها در شبکه ی بلوری وجود دارد. بدین ترتیب بزرگی مقدار b نشانگر بی-نظمی بیشتر در ماده ی آلیاژی است. بدین ترتیب با توجه به مقادیر پارامتر خمشی در چند نیمرسانا ملاحظه می شود که این مقدار در GaN_xAs_{1-x} بسیار بزرگ بوده و این خود می تواند بیانگر حضور بی-نظمی زیاد در ساختار بلوری این ماده باشد. علت بالا بودن غیر عادی پارامتر خمشی در GaN_xAs_{1-x} می تواند ناشی از دو عامل باشد: ۱- کوچک بودن اندازه ی اتمهای نیتروژن نسبت به اتمهای As (شعاع اتم نیتروژن 0.068 nm در مقایسه با شعاع اتم آرسنیک 0.121 nm)، ۲- الکترونگاتیویته ی بالای نیتروژن (۳/۴۱) در مقایسه با آرسنیک (۲/۱۸) [۱، ۲، ۱۰ و ۱۲].

با توجه به گزارش محققین، با ورود تنها 1% کسر مولی نیتروژن به نیمرسانای $GaAs$ ، کاهشی به میزان 0.18 eV در مقدار گاف نواری مشاهده شده است [۸-۱۰].

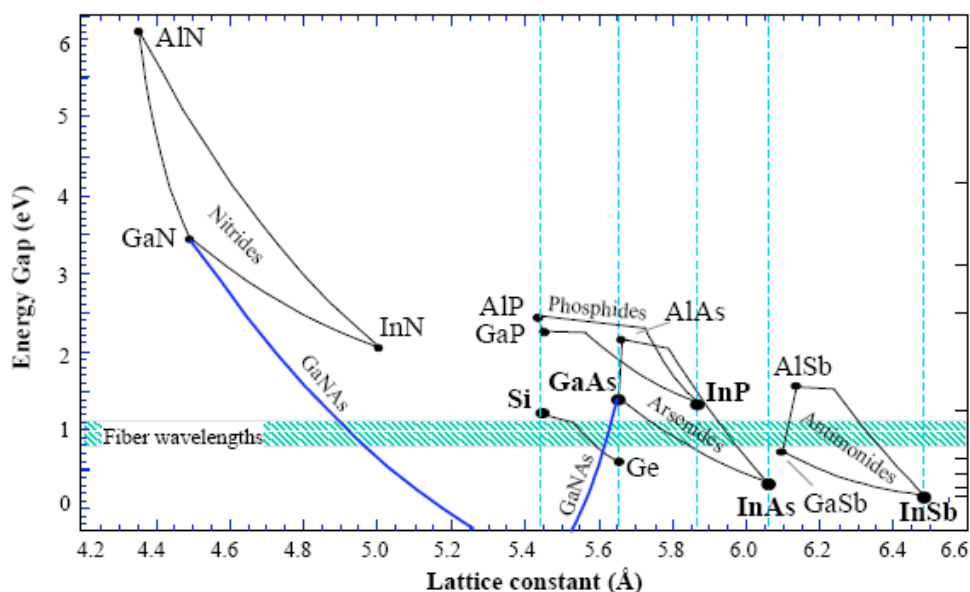
جدول (۱-۲): مقادیر پارامتر خمش گاف نواری نیمرساناهای آلیاژی سه تایی [۸و۴]

ترکیب نیمرسانا	پارامتر خمش (eV)
$Al_x In_{1-x} As$	۰
$Al_x Ga_{1-x} As$	۰/۶۹۸
$In_{1-x} Ga_x P$	۰/۷۸۶
$InAs_x Sb_{1-x}$	۰/۵۶
$GaN_x As_{1-x}$	$\approx 26 \quad x < 1\%$ $\approx 18 \quad 1 < x < 5\%$

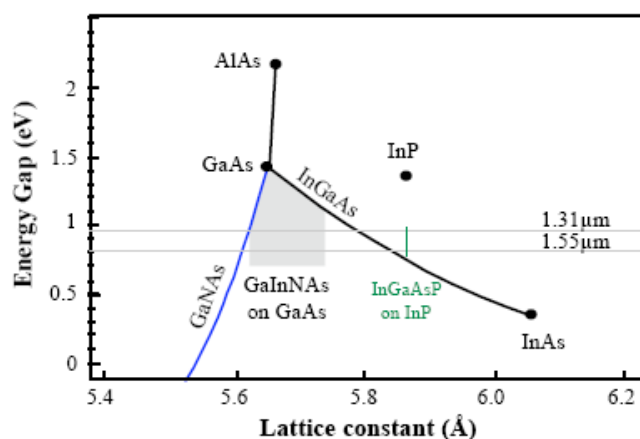
نکته‌ی قابل توجه اینکه با افزودن In ثابت شبکه رو به افزایش می‌گذارد بطوری که با انتخاب مناسب تراکم In و N ، که غالباً به صورت $(y \approx 3x)$ گزارش شده است [۱۱]، می‌توان بین $In_y Ga_{1-y} N_x As_{1-x}$ و زیر لایه‌ی به کار گرفته شده ($GaAs$ یا InP) جفت شدگی شبکه‌ای بوجود آورد که این می‌تواند به کاهش کرنش در لایه‌ی رشد داده شده‌ی $In_y Ga_{1-y} N_x As_{1-x}$ نسبت به $GaN_x As_{1-x}$ منجر شود [۱۱].

شکل (۱-۲) تغییرات گاف نواری مربوط به چند نیمرسانای آشنا را بر حسب ثابت شبکه‌ی^۱ آنها نشان می‌دهد. با توجه به ترکیبات مورد توجه ما در این رساله، یعنی مواد نیتروژندار رقیق، شکل (۲-۲) این تغییرات را با وضوح بیشتری نشان می‌دهد.

1- Lattice constant



شکل (۱-۲): تغییرات گاف نواری بر حسب ثابت شبکه‌ای برای برخی از نیمرساناها و آلیاژهای وابسته به آنها. به رفتار غیر عادی مربوط به خط آلیاژی GaNAs بین GaN و GaAs توجه کنید [۱۲].



شکل (۲-۲): گاف نواری بر حسب ثابت شبکه برای GaNAs, InGaAs, InGaAsP رشد یافته بر روی زیر لایه‌ی GaAs. در ناحیه‌ی سایه خورده در زیر خط آلیاژی GaNAs و InGaAs، می‌توان ترکیب چهارتایی InGaAsP را رشد داد [۱۲].

نکته‌ی جالب توجه و غیر عادی در مورد GaN_xAs_{1-x} اینکه با اضافه شدن N به $GaAs$ ، گاف نواری ابتدا رو به کاهش گذاشته و سپس رو به افزایش می‌رود. این در حالی است که در سایر موارد گاف نواری از روند بخصوصی که غالباً با تقریب خوبی از قانون وگارد^۱ پیروی می‌کند تغییر می‌یابد.

1- Vegard rule

در ادامه فصل مروری بر نظریه‌های موجود در زمینه‌ی توجیه ساختار نواری جدید در این نیمرساناها خواهیم داشت.

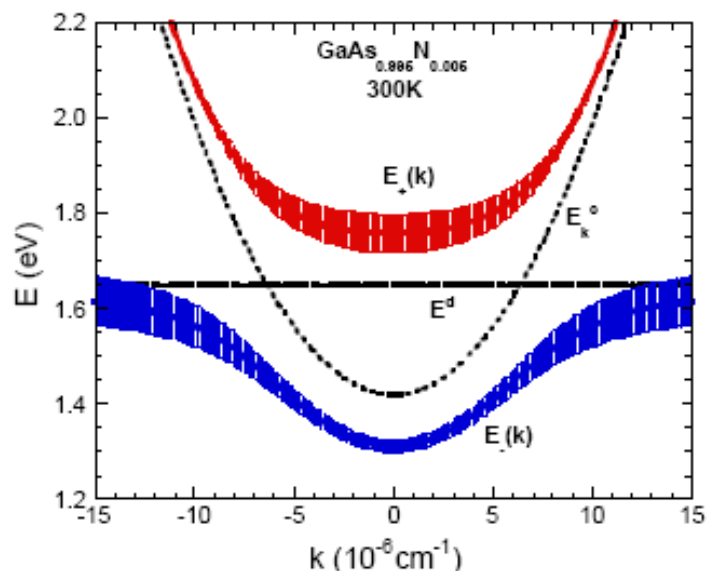
۲-۲- ساختار نواری در نیمرساناهای نیتروژندار رقیق. مدل برهمکنش تقاطع نواری (BAC) و مدل $k.p$

یکی از روشهای شناخته شده در توصیف رفتار ساختار نواری و به ویژه گاف نواری در مواد نیتروژندار رقیق، مدل برهمکنش تقاطع نواری می‌باشد [۱۸]. اگر چه این پدیده تا قبل از تهیه‌ی نیمرساناهای نیتروژندار رقیق بصورت تجربی مشاهده نشده بود، ولی قبلاً توسط والفورد [۱۹] و جالمارسون [۲۰] پیش بینی شده بود. در این مدل اتم نیتروژن تراز ناراستی E_d را که در فضای حقیقی جایگزیده^۲ و در فضای تکانه گسترده^۳ می‌باشد، در بالای نوار رسانش ایجاد می‌کند. از تقاطع نوار رسانش و تراز ناراستی، ترازهای انرژی یکدیگر را دفع کرده، سبب تشکیل زیر نوارهای E_+ و E_- می‌شوند که همین امر موجب کاهش گاف نواری می‌گردد. موقعیت انرژی نوارهای جدید E_+ و E_- از معادله‌ی زیر بدست می‌آیند:

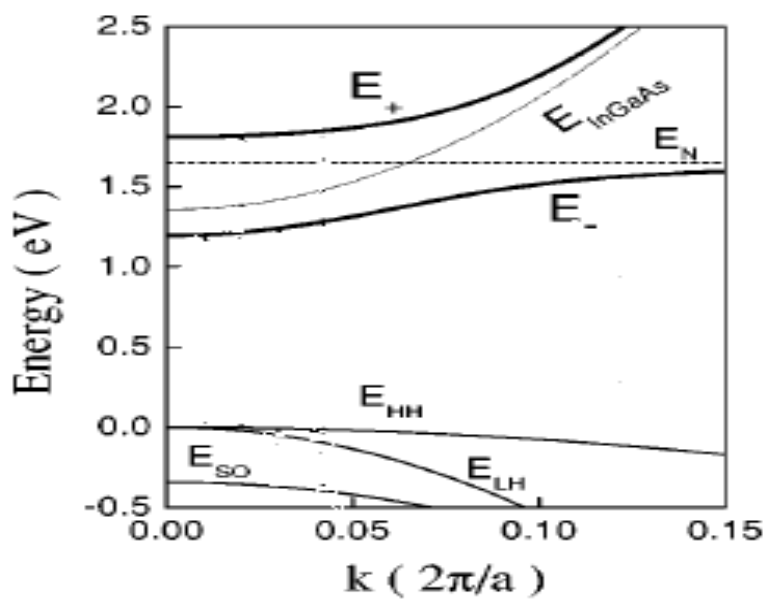
$$E_{\pm}(k) = \frac{1}{2} \left\{ [E_M(k) + E_N] \pm \sqrt{(E_N - E_M(k))^2 + 4xV^2} \right\} \quad (۴-۲)$$

به طوری که در این رابطه E_N انرژی حالت‌های نیتروژنی جایگزیده، $E_M(k)$ نوار رسانش میزبان و V پارامتر جفت شدگی^۴ هستند. شکل (۲-۳- الف و ب) نتایج بدست آمده از مدل BAC را در نیمرساناهای $GaN_{0.005}As_{0.995}$ و $In_{0.04}Ga_{0.96}N_{0.01}As_{0.99}$ نشان می‌دهد. انرژی تراز نیتروژن در محاسبات مربوط به شکل (۲-۳- الف)، $E_N = E_C + 0.23 \text{ eV}$ در نظر گرفته شده است [۲۴]. در شکل (۲-۳- ب) شکافتگی نوار $InGaAs$ میزبان با ورود نیتروژن به E_- و E_+ ، کاملاً مشخص است. در جدول (۲-۲) پارامترهای BAC مربوط به بعضی از نیمرساناهای نیتروژندار رقیق آمده است.

1- Defect level
2- Localized
3- Expanded
4- Coupling parameter



(الف)



(ب)

شکل (۲-۳): شکافتگی نوار رسانش مربوط به پیش بینی مدل BAC در

(الف) $\text{GaN}_{0.005}\text{As}$ و (ب) $[\text{In}_{0.04}\text{Ga}_{0.01}\text{As}]_{0.95}$.

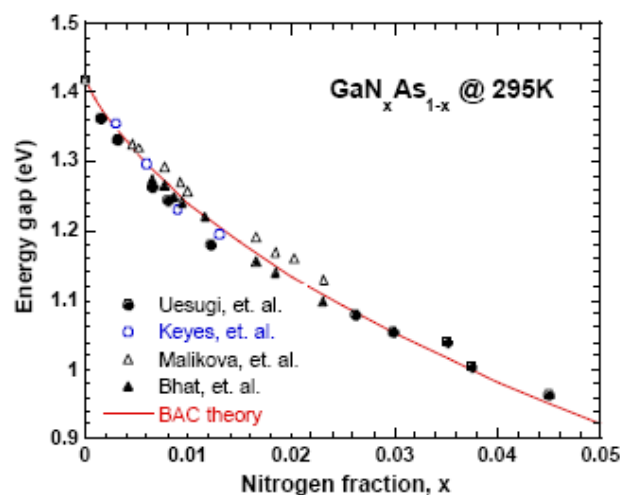
جدول (۲-۲): پارامترهای مدل BAC مربوط به بعضی از نیمرساناهای نیتروژندار رقیق [۲۳]

ترکیبات نیمرسانا	$E_N (eV)$	$V(eV)$
GaNAs	۱/۶۵	۲/۷
InNAs	۱/۴۴	۲/۰
$In_x Ga_{1-x} AsN$	$۱/۶۵(1-x) + ۱/۴۴ x - ۰/۳۸ x (1-x)$	$۲/۷(1-x) + ۲ x - ۳/۵ x (1-x)$
GaNP	۲/۱۸	۳/۰۵
$In_x Ga_{1-x} NP$	$۲/۱۸(1-x) + ۱/۷۹ x$	$۳/۰۵(1-x) + ۳/۰ x - ۳/۳ x (1-x)$

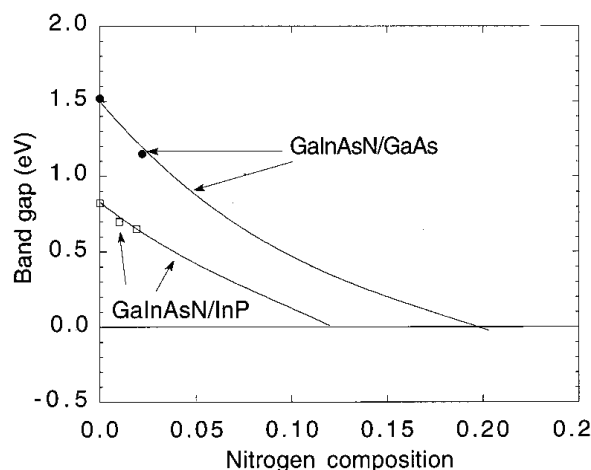
شکل (۲-۴- الف و ب) مقادیر مربوط به گاف نواری ترکیبات $In_y Ga_{1-y} N_x As_{1-x}$ و $GaN_x As_{1-x}$ را در دمای اتاق بر حسب کسر مولی نیتروژن در نمونه‌های پژوهشگران مختلف به همراه پیش بینی مدل BAC نشان می‌دهد. شکل مذکور گواه این مطلب است که پیش بینی این نظریه تطابق بسیار خوبی با داده‌های تجربی دارد.

یکی از پیامدهای مدل BAC، روش به اصطلاح ۱۰ نواری $k.p$ است [۳۱ و ۳۲]. با فرض اینکه k_{max} بردار موج بیشینه در منطقه‌ی اول بریلوئن باشد، این نظریه به نحوی دقیق پاشندگی^۱ نواری را در حد بردارهای موج (k) کوچک ($|k| < ۰/۲ k_{max}$) توصیف می‌نماید. در این روش برهمکنش تراز نقص (دارای واگنی اسپینی^۲) ایجاد شده توسط N با نوار رسانش حاصل از مدل BAC، در نظر گرفته می‌شود. به طور معمول این روش در مطالعه‌ی آلیاژها و ساختارهای چاه کوانتومی نیمرساناهای (In)GaNAs بسیار مفید می‌باشد. روش ۶ نواری $k.p$ ، جفت‌شدگی میان نوار حفره-های سبک و سنگین با واگنی اسپینی و نوارهای شکافته شده را با به کارگیری هامیلتونی لوتینگر^۳ توجیه می‌نماید. روش ۸ نواری $k.p$ شامل جفت‌شدگی بین نوارهای رسانش و نوار رسانش با واگنی اسپینی می‌گردد.

1- Dispersion
2- Spin degenerate
3- Luttinger Hamiltonian



(الف)



(ب)

شکل (۲-۴): تطابق مدل BAC (خطوط توپر) با داده‌های تجربی مربوط به تغییرات گاف نواری بر حسب ترکیب نیتروژن در (الف) GaNAs (ب) InGaNaS با زیر لایه‌های GaAs و InP [۱۴، ۱۶، ۱۷ و ۲۷-۲۵].

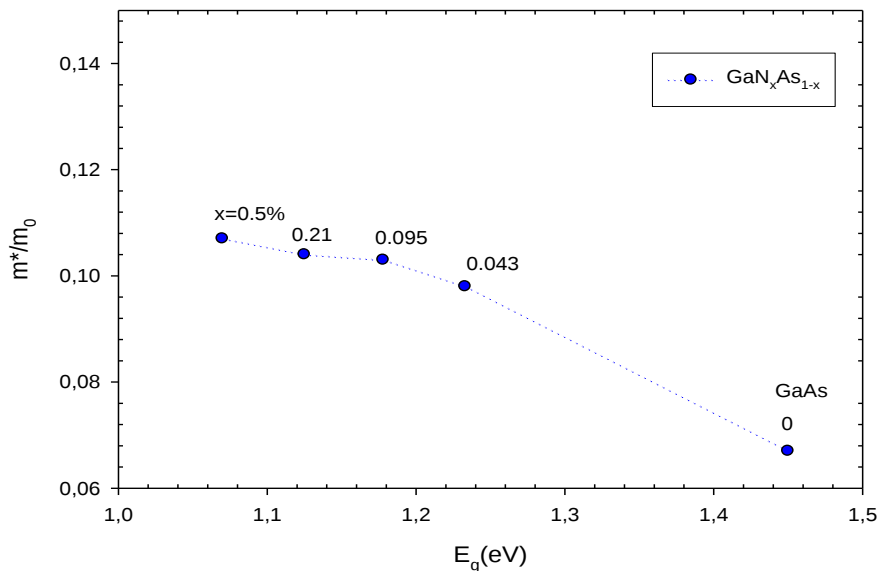
۲-۳- جرم مؤثر الکترون

یکی از کمیت‌های مهم در یک نیم‌رسانا جرم مؤثر وابسته به حامل‌های بار است که در بزرگی تحرک حاملها مؤثر است، این کمیت به نوبه‌ی خود نقش ویژه‌ای در کاربردهای قطعات نیم‌رسانا در الکترونیک و اپتو الکترونیک ایفا می‌نماید.

از آنجا که حضور اتمهای N در نیم‌رساناهای نیتروژندار رقیق $III - N - V$ ، باعث اختلال در نوار رسانش می‌شود و با توجه به رابطه‌ی جرم مؤثر و ساختار نواری به صورت:

$$m^* = \frac{-\hbar^2}{d^2 E / d^2 k} \quad (5-2)$$

انتظار می‌رود این اختلال بر جرم مؤثر الکترونهاي نوار رسانش تأثیر بگذارد. مشاهدات معمول در آلیاژها و دیگر نیم‌رساناهای مرسوم حاکی از افزایش جرم مؤثر با افزایش گاف نواری است [۳۰] اما این ارتباط در مورد ترکیب *GaNAs* متفاوت بوده، به نحوی که با افزایش گاف نواری جرم مؤثر کاهش می‌یابد. این ارتباط در شکل (۵-۲) نمایش داده شده است [۳۶].



شکل (۵-۲): تغییرات جرم مؤثر در *GaNAs* بر حسب گاف نواری [۳۶].

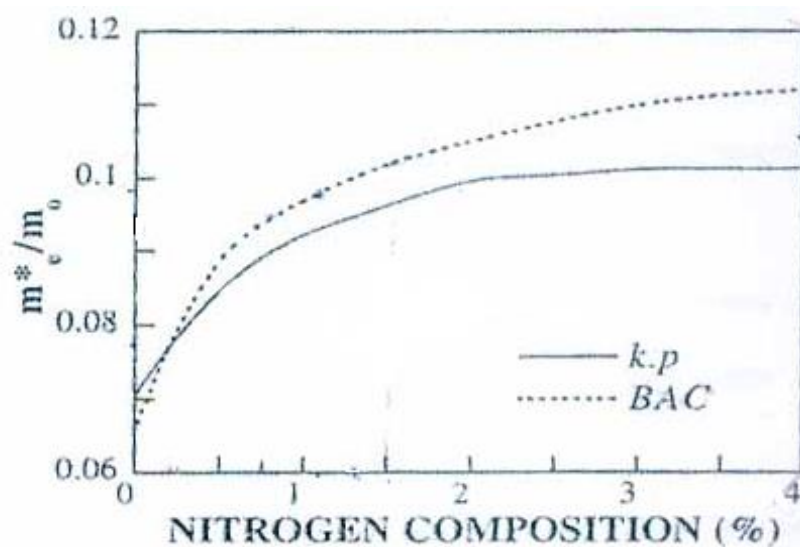
شکل (۶-۲) تغییرات جرم مؤثر الکترون را در GaN_xAs_{1-x} ، با استفاده از رابطه‌ی (۶-۲)، بر حسب تابعی از کسر مولی نیتروژن نشان می‌دهد. بنابر پیش‌بینی این مدل، جرم مؤثر الکترون تا حدود $x = 1\%$ با آهنگی سریع‌تر نسبت به $x < 1\%$ افزایش می‌یابد [۲]. اگر چه پیش‌بینی مدل *BAC* برای گاف نواری بسیار مناسب است، اما در پیش‌بینی دقیق جرم مؤثر چندان موفق نمی‌باشد. با وجود این در توجیه غیر سهمی بودن نوار رسانش و افزایش جرم مؤثر با نتایج تجربی سازگار است [۲۱، ۲۹]. مدل محاسباتی *k.p* در مقایسه با مدل *BAC*، برای x های کوچک با در نظر

گرفتن یک برهمکنش اضافی بین حالت‌های نواری و نواری کاملاً غیر سهمی رسانش، دارای یک مقدار اضافی جرم مؤثر می‌باشد [۲].

مدل BAC با استفاده از معادله‌ی (۵-۲) رابطه‌ی زیر را برای جرم مؤثر الکترون بدست می‌دهد:

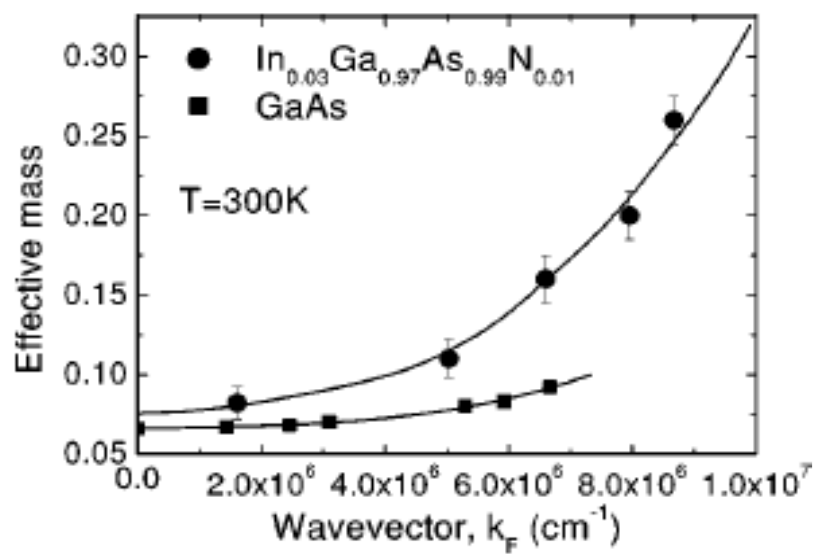
$$m^* = m_M \left(1 + \frac{xV^2}{(E_N - E_-)^2} \right) \quad (۶-۲)$$

که m_M جرم مؤثر الکترون در بلور میزبان می‌باشد.



شکل (۶-۲): مقایسه‌ی پیش‌بینی‌های مدل BAC و k.p در زمینه‌ی جرم مؤثر ترکیب GaNAs [۲].

شکل (۷-۲) جرم مؤثر الکترون را بر حسب بردار موج فرمی در آلیاژ $In_{0.03}Ga_{0.97}N_{0.01}As_{0.99}$ نشان می‌دهد. همانگونه که مشاهده می‌شود علاوه بر تطابق بسیار خوب بین داده‌های تجربی جرم مؤثر و مدل BAC، شاهد آهنگ کندتر افزایش جرم مؤثر در GaAs در مقایسه با نمونه‌ی ایندیوم‌دار هستیم.



شکل (۷-۲): جرم مؤثر الکترون بر حسب بردار موج فرمی در آلیاژ InGaAs و GaAs [۱۱].

- [1]- J. Toivonen, T. Halkariainen, *et al.* J.Cryst. Growth. **221**, 456 (1996).
- [2]- I. A. Buyanova, W. M. Chen, " Physics and Application of dilute nitrides ", Taylor & Francis Books Inc (2004).
- [3]- P. R. C. Kent, A. Zunger, Phys. Rev. B. **64**, 115208 (2001).
- [4]- W. G. Bi, C. W. Tu, " Bowing parameter of the band-gap energy of GaNAs ", Appl. Phys. Lett. **70**, 1608 (1997).
- [5]- J. Salzman, H. Temkin, " III-N-V compounds for infrared application ", Material Science and Engineering B**50**, 148 (1997).
- [6]- H. P. Hjalmarson, *et al.* Phys. Rev. Lett. **44**, 810 (1980).
- [7]- J. Singh, " Semiconductor Optoelectronic ", Mc Graw-Hill, Inc (1995).
- [8]- M. Weyers, M. Sato, H. Ando, Jpn. J. Appl. Phys. **31**: L 583 (1992).
- [9]- Su-Huai Wei and A. Zunger, Phys. Rev. Lett. **76**, 664 (1996).
- [10]- I. A. Buyanova, W. M. Chen, B. Monemar, " Electronic properties of Ga(In)AsN alloys ", MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **6**, 2 (2001).
- [11]- C. Skierbiszewski, *et al.* " Band structure and optical properties of InGaNAs alloys ", Phys. Rev. B. **V65**, 035207 (2001).
- [12]- M. A. Wistey, " GROWTH OF 1.5 μm GaInNAsSb VERTICAL CAVITY SURFACE EMITTING LASERS BY MOLECULAR BEAM ", PhD thesis, Stanford University (2006).
- [13]- S. H. Wei, A. Zunger, Phys. Rev. Lett. **76**, 664 (1996).
- [14]- K. Uesugi, N. Marooka, I. Suemune, Appl. Phys. Lett. **74**, 1254 (1999).
- [15]- L. Bellaiche, " Band gaps of lattice-matched (GaIn)(AsN) alloys ", Appl. Phys. Lett. **75**, 2578 (1999).
- [16]- F. D. Jones, *et al.* Proc. SPIE 3621, 52 (1999); I. J. Fritz. Phys. Rev. **60**, 4430 (1999).
- [17]- M. R. Gokhale, J. Wei, H. Wang, Appl. Phys. Lett. **74**, 1287 (1999).
- [18]- W. Shan, *et al.* " Band anticrossing in GaInNAs alloys ", Phys. Rev. Lett. **82**, 1221 (1999).
- [19]- D. J. Walford, *et al.* " Nitrogen isoelectronic in GaAs ": Springer- Verlag , pp.627-630 (1985).
- [20]- H. P. Hjalmarson, *et al.* Phys. Rev. Lett. **V44**, pp. 810 (1980).
- [21]- C. Skierbiszewski, *et al.* " Large nitrogen induced increase of electron effective mass in $\text{In}_y\text{GaN}_x\text{As}$ ", Appl. Phys. Lett. **76**, 2409 (2002).

- [22]- P. R. C. Kent, " Electronic structure evolution of dilute III-V Nitrides alloys ", dilute ntride semiconductors, chapter 12 (2005).
- [23]- I. Vurgaftman, J. R. Meyer, " Band parameters of nitrogen containing semiconductors ", J. Appl. Phys. **V94**; 3675-3696 (2003).
- [24]- D. J. Walford, J. A. Bradley, " Physics of semiconductors ", Springer, New York, (1984).
- [25]- B. M. Keyes, *et al.* NCPV photovolatics program review, AIP Conf. Proc. **462**, 511 (1999).
- [26]- L. Malikova, *et al.* J. Electron. Matter. **27**,484 (1998).
- [27]- R. Bhat, C. Caneau, J. Cryst. Growth. **195**, 427 (1998).
- [28]- E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids. **1**, 249 (1957).
- [29]- P. N. Hai, W. M. Chen, *et al.* " Direct determination of electron effective mass in GaNAs/GaAs quantum wells ", Appl. Phys. Lett. **77**, 1843 (2002).
- [30]- J. Singh, " Semiconductor Optoelectronic ", Mc Graw-Hill, Inc (1995).
- [31]- E. P. O'Reilly and A. Lindsay, " k.p model of orderd GaNAs ", Phys. Stat. Sol.(b) **216**, 131 (1999).
- [32]- E. P. O'Reily, *et al.* Semicond. Sci. Technol. **17**, 870 (2002).
- [33]- J. R. Chelikowski and M. L. Cohen, Phys. Rev. B. **V10**, 5095 (1974).
- [34]- L. Bellaiche, *et al*, Phys. Rev. B. **V54**, 17568 (1996).
- [35]- T. Mattila, Su- Huai Wei and A. Zunger, Phys. Rev. B. **V60**, 11245 (1999).
- [36]- F. Maisa, *et al.*, " Early manifestation of localization effects in GaNAs ". Appl. Phys. Lett. **82**, 4474 (2003).
- [37]- J. Toivonen, " Growth and properties of GaNAs structures ", PhD Thesis, Helsinki University of Technology, Espoo, Finland (2003).

فصل سوم

نظریه ترابری حاملها در میدان پائین در ترکیبات

نیتروژندار رقیق

AlGaNA_s و InGaNA_s، GaNA_s

خواص ترابری یک نیمرسانا شامل تراکم حاملهای رسانشی و تحرک آنها، تحت تأثیر اتمهای ناخالصیهای بخشنده و پذیرنده، و همچنین فرآیندهای گوناگون پراکندگی در شبکه‌ی بلوری است. هدف ما در این فصل معرفی نظریه‌های حاکم در این مورد بوده که در بررسی خواص ترابری الکتریکی مواد نیتروژندار رقیق که در فصل (۴) آمده است، به کار گرفته شده‌اند.

۳-۱- نظریه‌ی پراکندگی و سازوکارهای مؤثر در تحرک

در یک نیمرسانا در حالت تعادل گرمایی، حاملهای بار با سرعت بالا به صورت کتره ای در تمام راستاها در حال حرکت هستند و با اتمهای شبکه و ناخالصیها برخورد می‌کنند که این امر موجب می‌شود تا مسافت کل طی شده توسط هر حامل بار در یک دوره زمانی صفر باشد. هنگامی که میدان الکتریکی به ماده اعمال می‌گردد حاملها از میدان الکتریکی نیرو دریافت کرده و در فاصله میان دو برخورد در امتداد میدان شتاب می‌گیرند، بنابراین یک مولفه سرعت اضافی به حرکت گرمایی اضافه می‌شود که سرعت سوق^۱ نام دارد. بزرگی این سرعت در حد میدانهای الکتریکی ضعیف با میدان الکتریکی متناسب است.

$$v_d \propto E \quad (۱-۳)$$

ثابت تناسب در این رابطه را تحرک حامل بار می‌نامند. بنابراین:

$$v_d = \mu.E \quad (۲-۳)$$

بزرگی تحرک در یک شبکه بلوری به حضور سازوکارهای مختلف که در پراکندگی حاملها مؤثرند بستگی دارد. با شناخت این سازوکارها و تأثیر آنها در بازه‌های دمایی گوناگون در نمونه‌های مختلف که در شرایط رشد متفاوتی بوده‌اند می‌توان به شرایط بهینه رشد بلور مورد نظر پی برد.

1- Drift velocity

به لحاظ میکروسکوپی، تحرک حاملها (μ) با جرم مؤثر حاملی (m^*) مورد نظر و زمان میانگین بین دو برخورد متوالی (τ) در ارتباط است به طوری که:

$$\mu = \frac{q\tau}{m^*} \quad (3-3)$$

در حالت کلی کمیت τ تابع انرژی حاملها است ولی با فرض حضور سازوکارهای مستقل پراکندگی که هر کدام با کمیت τ_i (زمان واهلش^۱ متناظر با سازوکار پراکندگی i ام) معرفی می‌شوند می‌توان انتظار داشت که احتمال پراکندگی کل در مدت زمان dt از رابطه‌ی زیر پیروی کند [۱]:

$$\frac{dt}{\tau} = \sum_i \frac{dt}{\tau_i} \quad (4-3)$$

یا

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} \quad (5-3)$$

با توجه به رابطه‌ی (۳-۳) رابطه‌ی اخیر را می‌توان به صورت زیر نوشت که به قاعده ماتیسسن^۲ موسوم است:

$$\dots \frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} + \quad (6-3)$$

برای حفره‌ها نیز می‌توان چنین رابطه‌هایی را در نظر گرفت، پس رسانندگی کل را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p) \quad (7-3)$$

ما در این رساله به چند عامل مهم از سازوکارهای پراکندگی که تأثیر بیشتری بر تحرک حاملها در ترکیبات نیتروژندار رقیق دارند، می‌پردازیم. از جمله این پراکندگی‌ها می‌توان به پراکندگی‌های ذاتی شامل پراکندگی فوفونی قطبی - نوری، پراکندگی پیزو الکتریک، پراکندگی فونونهای اکوستیکی و پراکندگی غیرذاتی شامل پراکندگی ناخالصی یونیده و خنثی، پراکندگی حاصل از دررفتگی‌ها و نیز پراکندگی‌های آلیاژی اشاره کرد. لازم به ذکر است که از بین این سازوکارها، پراکندگی‌های ناخالصی یونیده، پراکندگی ناشی از دررفتگی‌ها و پراکندگی آلیاژی از اهمیت بیشتری برخوردار

1-Relaxation time
2- Matthiessen rule

هستند. در ادامه به معرفی سازوکارهای مختلف پراکندگی که در نیمرساناهای نیتروژندار رقیق $GaNAs$ ، $InGaNAs$ ، $AlGaNAs$ نقش مهمی ایفا می کنند، می پردازیم.

۳-۱-۱- پراکندگی ناخالصی یونیده^۱

در دماهای پائین سرعت گرمایی حاملها کاهش یافته و همین عامل موجب آن می شود تا اثر برهمکنش کولنی ناخالصیهای یونیده بر حرکت حاملها افزایش یابد. در این شرایط پراکندگی ناخالصی های یونیده می تواند از جمله سازوکارهای غالب در محدود سازی تحرک حاملها باشد که به صورت زیر قابل پیش بینی است [۲]:

$$\mu_{II} = \frac{128(2\pi)^{\frac{1}{2}} \varepsilon_s^2 (k_B T)^{\frac{3}{2}}}{q^3 (m^*)^{\frac{1}{2}} (n + 2N_a)} \left[\ln(1+b) - \frac{b}{1+b} \right]^{-1} \quad (۸-۳)$$

که در آن b و n' عبارتند از:

$$b = \frac{24m^* \varepsilon_s (k_B T)^{\frac{1}{2}}}{q^2 \hbar^2 n'} \quad (۹-۳)$$

$$n' = n + \frac{(N_d - N_a - n)(n + N_a)}{N_d} \quad (۱۰-۳)$$

در این رابطه N_d و N_a به ترتیب تراکم ناخالصیهای بخشنده و پذیرنده، ε_s ثابت دی الکتریک نسبی، m^* جرم مؤثر الکترون، n مقدار تجربی تراکم الکترونی، q بار الکتریکی حامل، k_B ثابت بولتزمن، $\hbar$ حاصل نسبت ثابت پلانک بر 2π و T دما بر حسب کلون است.

۳-۱-۲- پراکندگی پیزو الکتریک^۱

تحرك محدود شده تحت تأثير پراکندگی فونونهای پیزو الکتریک با رابطه‌ی زیر داده می- شود [۳]:

$$\mu_{pz} = \frac{16(2\pi)^{\frac{1}{2}} \rho v_s^2 \hbar^2 q}{3 \left(\frac{qh_{pz}}{\epsilon_s} \right)^2 (m^*)^{\frac{1}{2}} (k_B T)^{\frac{1}{2}}} \quad (۱۱-۳)$$

که v_s سرعت صوت در ماده، ρ چگالی جرمی و h_{pz} ضریب پیزو الکتریک می‌باشد. این مقادیر در مورد $GaAs$ به ترتیب برابر $\frac{m}{s} \times 10^2 \times 6/59$ ، $\frac{gr}{cm^3} \times 5/32$ و $\frac{C}{m^3} \times 0/211$ می‌باشند [۴].

۳-۱-۳- پراکندگی فونونی آکوستیک^۲

یکی دیگر از سازوکارهای مهم پراکندگی در نیمرساناها، پراکندگی فونونهای آکوستیک است. تحرك محدود شده با این سازوکار توسط فرمول زیر داده شده است [۵]:

$$\mu_{ac} = \frac{2(2\pi)^{\frac{1}{2}} \rho v_s^2 \hbar^4 q}{3 E_{def}^2 (m^*)^{\frac{5}{2}} (k_B T)^{\frac{3}{2}}} \quad (۱۲-۳)$$

که در آن E_{def} پتانسیل تغییر شکل^۳ بوده و مقدار آن برای $GaAs$ برابر با $9/3 \text{ eV}$ می‌باشد [۴].

۳-۱-۴- پراکندگی فونونی قطبی - نوری^۴

در دماهای بالا از پراکندگی فونونهای قطبی - نوری به عنوان سازوکار غالب محدود کننده‌ی تحرك نام برده می‌شود و به صورت فرمول زیر داده می‌شود [۶]:

$$\mu_{po} = 0.199 \left[\frac{T}{300} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{q}{\epsilon_c^*} \right] \left[\frac{m_0}{m^*} \right]^{\frac{3}{2}} (10^{22} M) (10^{23} V_a) (10^{-13} \omega_{Lo}) (e^z - 1) (G(z)) \quad (۱۳-۳)$$

-
- 1- Piezoelectric scattering
 - 2- Acoustic phonon scattering
 - 3- Deformation potential
 - 4- Polar- optical phonon scattering

که در آن ε_c^* به صورت رابطه (۱۴-۳) تعریف می‌شود و به بار مؤثر یونی کالن^۱ موسوم است.

$$\varepsilon_c^* = \sqrt{M\omega_{LO}^2 V_a \varepsilon_0 \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right)} \quad (14-3)$$

در این رابطه ε_∞ ثابت دی‌الکتریک نوری (فرکانس بالا)، ε_0 ثابت دی‌الکتریک، M جرم کاهش یافته‌ی نزدیک‌ترین اتمهای همسایه می‌باشد. همچنین V_a حجم یک سلول واحد است که مقدار آن $1/8 \times 10^{-22} \text{ cm}^3$ در نظر گرفته شده است [۷]، θ_{LO} دمای فونونی در GaNAs می‌باشد که مقدار آن 423 K گزارش شده است [۴]. بدین ترتیب مقدار ω_{LO} برای GaNAs برابر با $5/5 \times 10^{13} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$ بدست می‌آید. در رابطه‌ی (۱۳-۳) عبارت $G(z)$ ، تابعی از z با تغییرات آهسته است که z تابعی از دماست:

$$z = \frac{\hbar\omega_{LO}}{k_B T} = \frac{\theta_{LO}}{T} \quad (15-3)$$

۳-۱-۵- پراکندگی از ناخالصی‌های خنثی^۲

یکی دیگر از عوامل محدود کننده‌ی تحرک الکترونی در دماهای پائین پراکندگی ناشی از اتمهای ناخالصیهای خنثی است که باید در نیمرساناهایی که میزان یونیدگی اتمهای ناخالصی پائین است، در نظر گرفته شود [۸]. با توجه به محاسبات انجام شده [۹] احتمال پراکندگی بوسیله‌ی اتمهای ناخالصی خنثی با رابطه‌ی زیر داده می‌شود [۸]:

$$\frac{1}{\tau_N} = 1.22 \times 10^{-7} \varepsilon_s N_N \left[\frac{m}{m^*} \right]^2 \quad (16-3)$$

که N_N تراکم کل ناخالصی‌های خنثی است.

1- Callen's effective ionic charge

2- Neutral impurity scattering

۳-۱-۶- پراکندگی توسط دررفتگی‌های بلوری^۱

نواقص بلوری را می‌توان از عوامل تأثیر گذار بر میزان تحرک دانست. از جمله این نواقص، دررفتگی‌های موجود در نمونه می‌باشند که می‌توانند نقش مهمی را در کاهش تحرک الکترونی ایفا کنند. رابطه‌ی (۳-۱۷) بیانگر تحرک محدود شده توسط این سازوکار پراکندگی است [۱۰]:

$$\mu_{dis} = \frac{30\sqrt{2\pi}\epsilon_s^2\epsilon_0^2d^2(k_BT)^{3/2}}{q^3N_{dis}f^2L_Dm^{*1/2}} \quad (3-17)$$

که در آن d فاصله بین مراکز نقایص در امتداد خط دررفتگی است که در حدود ثابت شبکه‌ای می‌باشد و N_{dis} چگالی دررفتگی‌ها در واحد سطح، f کسری از مراکز است که اشغال شده‌اند و آنرا برابر با یک در نظر می‌گیریم. L_D طول دبای است که با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$L_D = \sqrt{\epsilon_s\epsilon_0 \frac{k_BT}{q^2n(T)}} \quad (3-18)$$

بطوریکه $n(T)$ بستگی دمایی تراکم حاملها را نشان می‌دهد.

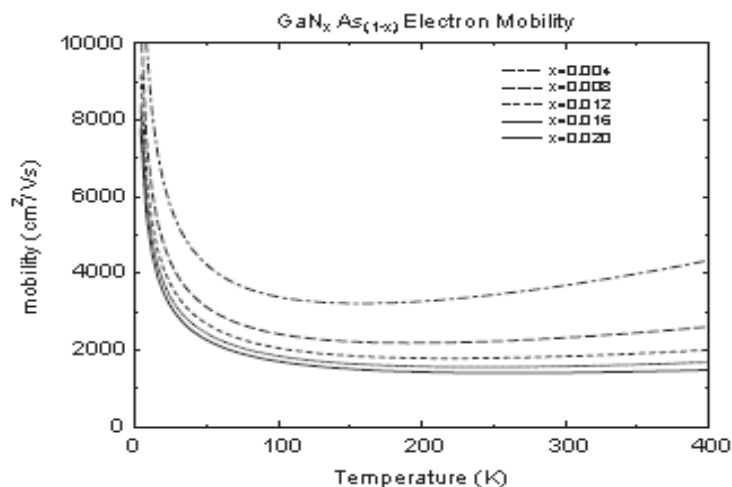
۳-۱-۷- پراکندگی آلیاژ کتره‌ای^۲

در مواد نیتروژندار رقیق و بخصوص *GaNAs*، یافتن مدل پیشرفته و کاملی برای یک آلیاژ بلور کتره‌ای کار دشواری است، بویژه آنکه وجود اتمهای نیتروژن موجب اختلال بزرگی در ساختار نواری می‌گردد که این امر پراکندگی قوی الکترونی را به دنبال دارد.

با استفاده از فرمولبندی‌های مربوط، تحرک حاملهای نوع n با رابطه‌ی زیر مشخص می‌گردد [۱۱]:

$$\mu^{-1} = \frac{\sqrt{3m^*k_BT}}{e} \pi \left(\frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left(\frac{dE_c}{dx} \right)^2 a_0^3 x \quad (3-19)$$

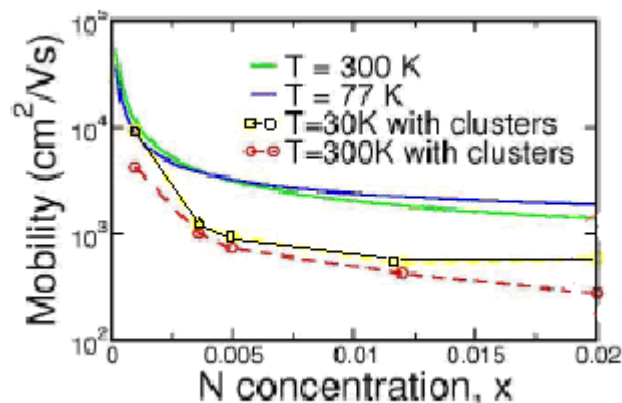
که در آن a_0 ثابت شبکه‌ای بلور و $\left(\frac{dE_c}{dx} \right)$ تغییرات لبه‌ی گاف نواری بر حسب غلظت نیتروژن می‌باشد. شکل (۳-۱) محاسبات نظری فاهی و همکاران [۱۱] را به ازای مقادیر مختلف x نشان می‌دهد.



شکل (۳-۱): وابستگی دمایی تحرک الکترونی محاسبه شده به صورت نظری در نیمرسانای نیتروژندار رقیق $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ با x های متغیر [۱۱].

۳-۱-۸- پراکندگی آلیاژ خوشه‌ای^۱

همانگونه که در فصل (۲) اشاره شده، بخش (۲-۱)، حضور اتمهای N در شبکه‌ی بلوری GaAs منجر به این می‌گردد که توزیع فضایی اتمها تماماً به صورت کتره‌ای صورت نگیرد و خوشه‌هایی در ماده تشکیل شوند. پراکندگی حاصل از این خوشه‌ها توسط فاهی و اوریلی [۱۱] محاسبه گردیده که نتایج آن در شکل (۳-۲) نشان داده شده است. در این شکل منحنی‌های خط‌چین پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای را در دماهای ۳۰ و ۳۰۰ کلوین و منحنی‌های خط پر، پراکندگی آلیاژی کتره‌ای در دماهای ۷۷ و ۳۰۰ کلوین هستند. چنانچه از شکل پیداست تشکیل خوشه‌های نیتروژنی تا حد زیادی از تحرک الکترونی می‌کاهد.



شکل (۳-۲): مقادیر نظری تحرک الکترونی حاصل از پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای (خط چین) و کتره‌ای (خط توپر) در GaNAs بر حسب کسر مولی N [۱۱].

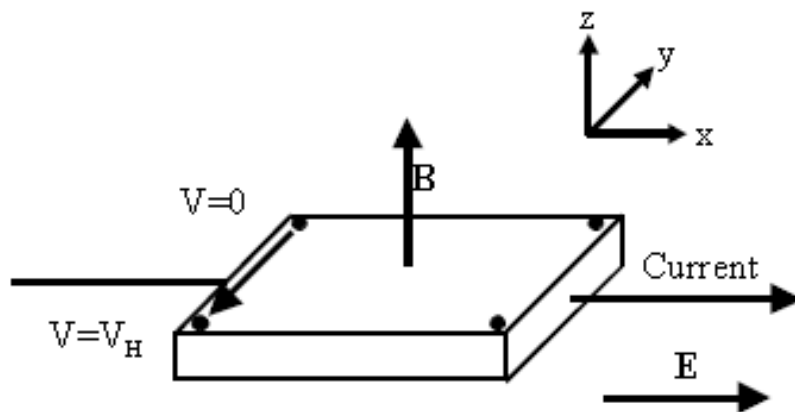
اکنون با توجه به شناخت سازوکارهای محدود کننده‌ی تحرک به طور جداگانه، می‌توان اثر کلی این عوامل در حاملها را با توجه به قاعده ماتیسن از رابطه (۳-۲۰) پیدا کرد:

$$\frac{1}{\mu_{tot}(T)} = \frac{1}{\mu_{II}(T)} + \frac{1}{\mu_{PO}(T)} + \frac{1}{\mu_{NI}(T)} + \frac{1}{\mu_{dis}(T)} + \frac{1}{\mu_{alloy}(T)} + \frac{1}{\mu_{clus}(T)} + \frac{1}{\mu_{ac}(T)} + \frac{1}{\mu_{PZ}(T)} \quad (۳-۲۰)$$

که سمت چپ این عبارت نشان دهنده‌ی پراکندگی کل و جملات سمت راست به ترتیب مربوط به سهم‌های پراکندگی‌های حاصل از ناخالصی‌های یونیده، فونونهای قطبی-نوری، ناخالصی‌های خنثی، دررفتگی‌ها، آلیاژی کتره‌ای، آلیاژی خوشه‌ای، فونونهای آکوستیک و فونونهای پیزو الکتریک مربوط است.

۳-۲- تعیین تراکم و نوع حاملهای بار

به منظور درک هر چه بیشتر از رفتار نیمرسانا، علاوه بر تحرک حاملها لازم است از تراکم آنها نیز در شرایط دمایی مختلف مطلع باشیم. یک روش مرسوم در تعیین این کمیت استفاده از اثر هال است. در این پدیده، شکل (۳-۳)، با عبور جریان از نیمرسانا، میدان مغناطیسی عرضی به آن اعمال می‌گردد. در این شرایط حاملهای بار متحمل نیروی عرضی (عمود به جهت سرعت و راستای میدان مغناطیسی) می‌شوند. این نیرو حاملهای بار را منحرف ساخته و در وجه نیمرسانا انباشته می‌شوند. همین امر سبب ایجاد یک اختلاف پتانسیل عرضی می‌شود که به ولتاژ هال V_H موسوم است [۱۲].



$$\text{Lorentz Force } \mathbf{F} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

شکل (۳-۳): نمونه‌ی در معرض اندازه‌گیری هال با اعمال جریان در جهت محور x و میدان مغناطیسی

در جهت y، که انباشته شدن حاملها را در دو وجه نیم‌رسانا به دنبال دارد [۱۳].

در آزمایش هال برای تراکم حامل داریم: $n = \frac{r}{eR_H}$ که R_H ضریب هال و r فاکتور هال می‌باشد.

با توجه به مطالب فوق تحرک هال را می‌توان به کمک رابطه‌ی $\mu_H = \frac{R_H}{\rho}$ به دست آورد. از آنجا

که $\sigma = en\mu$ است (که در آن μ تحرک الکترونی است) می‌توان نوشت $\mu = \frac{\mu_H}{r}$. برای

نیم‌رسانای (In)GaAs فاکتور هال را برابر یک می‌گیرند [۴]. پس می‌توان نوشت:

$\mu = \mu_H$. بنابراین تحرکی که از آزمایش هال بدست می‌آید می‌تواند همان تحرک سوق باشد.

۳-۲-۱- مروری بر مبانی نظری تراکم حاملها در نیم‌رساناها

در بررسی خواص ترابری الکتریکی یک نیم‌رسانا اطلاع از تراکم حاملهای بار رسانشی حائز

اهمیت است. از آنجا که تعداد حاملهای بار الکترونها و حفره‌ها در واحد حجم بسیار زیاد است

(تقریباً 10^{17} – 10^{18} cm^{-3})، نمی‌توان رفتار هر ذره را به صورت منفرد بررسی کرد. بنابراین باید به

رفتار آماری آنها در بلور پرداخت.

۳-۲-۲- نحوه توزیع آماری بار در نیمرسانا

به منظور مطالعه رفتار آماری ذرات باید قوانینی که ذرات مورد نظر با توجه ماهیتشان از آنها پیروی می‌کنند را بدانیم. سه حالت برای توزیع ذرات در بین حالت‌های قابل دسترس وجود دارد. اولین حالت توزیع مبتنی بر تابع احتمال ماکسول - بولتزمن است. در این مورد ذرات مورد نظر تشخیص پذیر بوده و برای تعداد ذراتی که در یک حالت مجاز قرار می‌گیرند محدودیتی وجود ندارد. توزیع دوم تابع بوز - انیشتن است که برای ذرات تشخیص ناپذیر است و مانند حالت قبل برای تعداد ذراتی که در هر حالت کوانتومی قرار می‌گیرند محدودیتی وجود ندارد. توزیع سوم، تابع احتمال فرمی - دیراک است. در این مورد ذرات تشخیص ناپذیرند و در هر حالت کوانتومی تنها یک ذره می‌تواند قرار گیرد. توزیع الکترون‌ها در یک بلور از توزیع اخیر تبعیت می‌کند. به دلیل اهمیت این آمار برای ما در این رساله، به شرح کوتاهی از این تابع توزیع احتمال می‌پردازیم. بیشترین احتمال توزیع الکترون‌ها توسط تابع فرمی - دیراک داده می‌شود [۱۴]:

$$f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \quad (۲۱-۳)$$

که در آن E_F انرژی فرمی نامیده می‌شود. $f_F(E)$ احتمال آن است که یک حالت کوانتومی در انرژی E به وسیله یک الکترون اشغال شده باشد. در صفر کلوین الکترون‌ها در پائین‌ترین حالت‌های انرژی ممکن خود قرار دارند. در این حالت به ازای انرژی‌های پایین‌تر از انرژی فرمی ($E < E_F$)، احتمال اشغال آن حالت‌ها برابر یک و به ازای $E > E_F$ ، احتمال اشغال حالت‌ها برابر صفر است. در صورتی که اگر $T \neq 0K$ باشد، الکترون‌ها انرژی گرمایی کسب نموده و به ترازهای انرژی بالاتر برانگیخته می‌شوند. در این شرایط توزیع الکترون‌ها در حوالی انرژی فرمی در میان حالت‌های انرژی قابل دسترس تغییر می‌کند. در شرایطی که $E - E_F \gg k_B T$ باشد، عبارت نمایی در مخرج معادله (۲۱-۳) خیلی بزرگتر از مقدار واحد شده و می‌توان از عدد ۱ چشم‌پوشی کرد. به این ترتیب می‌توان تابع توزیع فرمی - دیراک را به تابع ماکسول - بولتزمن تقریب زد:

$$f_F(E) \approx \exp\left[\frac{-(E - E_F)}{k_B T}\right] \quad (۲۲-۳)$$

در تعادل گرمایی، تراکم الکترونیهای با انرژی E را می‌توان از رابطه‌ی زیر بدست آورد:

$$n(E) = g_c(E) f_E(E) \quad (23-3)$$

که در آن $g_c(E)$ چگالی حالت‌های کوانتومی مجاز در تراز E است. تراکم الکترونی کل در واحد حجم در نوار رسانش با انتگرال گیری از معادله (۲۳-۳) بر روی کل ترازهای انرژی در نوار رسانش به دست می‌آید. به طور مشابه توزیع حفره‌ها (در نوار ظرفیت) از حاصلضرب چگالی حالت‌های کوانتومی مجاز در نوار ظرفیت در احتمال عدم اشغال حالت مجاز کوانتومی به دست می‌آید:

$$P(E) = g_v(E) [1 - f_F(E)] \quad (24-3)$$

و تراکم کل حفره‌ها در واحد حجم با انتگرال گیری از معادله (۲۴-۳) روی کل انرژی نوار ظرفیت به دست می‌آید [۱۴].

۳-۲-۳- تراکم الکترون و حفره در تعادل گرمایی در یک نیمرسانای ذاتی

در $T = 0\text{ K}$ همه حالت‌های انرژی در نوار رسانش خالی از الکترون هستند، بنابراین انرژی فرمی در وسط انرژی‌های E_V و E_C (با فرض یکسان بودن جرم الکترون و حفره) قرار می‌گیرد [۳]. هنگامی که دما افزایش می‌یابد ($T > 0\text{ K}$) برخی از الکترونیهای واقع در نوار ظرفیت با دریافت انرژی گرمایی به نوار رسانش برانگیخته می‌شوند و بدین ترتیب زوج‌های الکترون - حفره تولید می‌گردند. از آنجا که جرم مؤثر الکترون‌ها و حفره‌ها کاملاً با هم یکسان نیستند، توابع چگالی حالت $g_v(E)$ و $g_c(E)$ نسبت به وسط گاف انرژی متقارن نبوده و برای نیمرسانای ذاتی (بدون هیچ‌گونه نقص و ناخالصی) به مقدار جزئی از وسط گاف انرژی به گونه‌ای انتقال می‌یابد که چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها با هم برابر شوند [۱۴]. با فرض اینکه E_F در یک نیمرسانای ذاتی در وسط گاف نواری باشد و تراکم الکترون و حفره را به ترتیب برای این نیمرسانا با n و p نشان دهیم، برای الکترون‌ها در نوار رسانش ($E > E_C$) با در نظر داشتن تابع احتمال فرمی - دیراک داریم [۳]:

$$n = \frac{(2^{1/2} m^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^2} \int_{E_C}^{\infty} \frac{(E - E_C)^{1/2} dE}{1 + \exp\left[\frac{(E - E_F)}{k_B T}\right]} \quad (25-3)$$

که m^* جرم مؤثر الکترون و E_C . انرژی کمینه‌ی نوار رسانش است. در صورتی که $E_C - E_F \gg k_B T$ باشد آنگاه $E - E_F \gg k_B T$ و تابع فرمی - دیراک را می‌توان به تابع ماکسول - بولتزمن تقریب زد. در این صورت با انتگرال گیری و انجام عملیات جبری داریم:

$$n = N_C \exp\left[-\frac{(E_C - E_F)}{k_B T}\right] \quad (۲۶-۳)$$

که در آن N_C چگالی مؤثر حالتها در لبه‌ی نوار رسانش می‌باشد و از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$N_C = 2.5 \times 10^{19} \left[\frac{m^*}{m_0}\right]^{3/2} \left[\frac{T}{300}\right]^{3/2} (cm^{-3}) \quad (۲۷-۳)$$

در مورد حفره‌ها نیز با جایگزین کردن E_V و N_V جرم مؤثر حفره (m_p^*) به ترتیب به جای E_C ، N_V و m^* روابطی مشابه به دست می‌آیند:

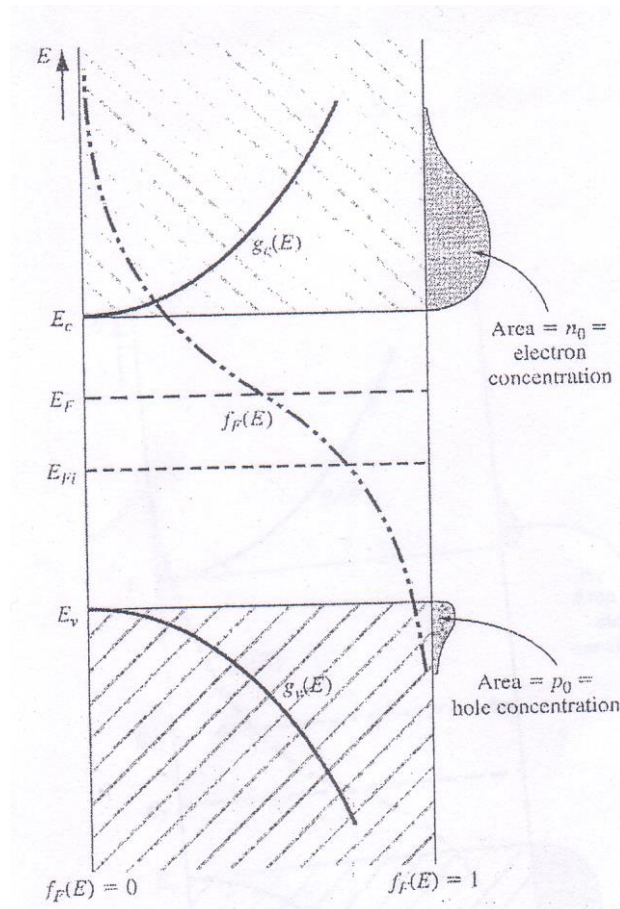
$$P = N_V \exp\left[-\frac{(E_F - E_V)}{k_B T}\right] \quad (۲۸-۳)$$

۳-۲-۴- اثر آلایش بر توزیع تعادلی الکترونها و حفره‌ها

برای به کارگیری نیمرساناها در قطعات الکترونیکی و اپتو الکترونیکی غالباً لازم است تا ماده‌ی مورد نظر با اتمهای ناخالصی بخصوص آلایش داده شود. این عمل به تشکیل ترازهای ناخالصی در گاف نواری ماده می‌انجامد. حضور این ترازها در گاف انرژی، توزیع الکترونها و حفره‌ها را تغییر می‌دهد. علت این امر را می‌توان با توجه به تغییر موضع تراز انرژی E_F توضیح داد. شکلهای (۳-۴) و (۳-۵) تغییرات موقعیت E_F را در حالت‌های $E_F > E_{midgap}$ که $E_F = \frac{1}{2}(E_C + E_V)$ می‌باشد، هنگامی که نیمرسانا عمدتاً^۱ با اتمهای بخشنده^۱ آلایش شده باشد و $E_F < E_{midgap}$ هنگامی که با اتمهای پذیرنده^۲ آلایش شده باشد، نشان می‌دهند. در وضعیت اول که تراکم الکترونها از حفره‌ها بزرگتر است نیمرسانا نوع n و در حالت دوم که تراکم حفره‌ها از الکترونها بیشتر خواهد بود نیمرسانا را نوع p می‌گویند.

1- Donors

2- Acceptors



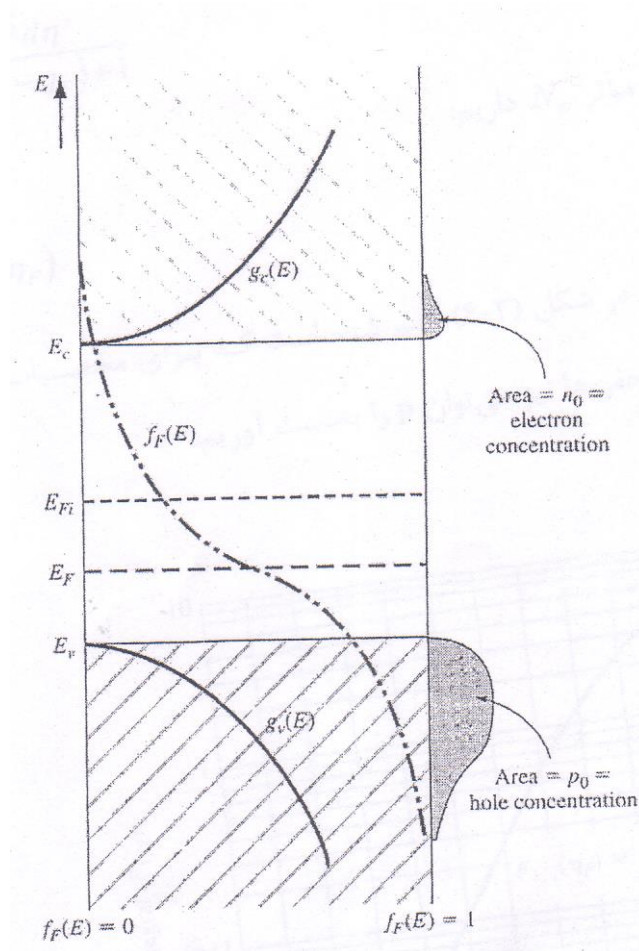
شکل (۴-۳): تابع چگالی حالت، تابع احتمال فرمی - دیراک و نمایش نواحی تراکم الکترون و حفره وقتی که تراز فرمی بالاتر از وسط گاف نواری قرار دارد [۱۴].

در یک نیمرسانای ذاتی، تراکم الکترونها در نوار رسانش n_i با تراکم حفرهها p_i در نوار ظرفیت مساوی است. با توجه به مقادیر تراکم ذاتی^۱ و تراز فرمی ذاتی E_{Fi} می توان تراکم الکترون و حفره را در تعادل گرمایی از روابط زیر به دست آورد [۱]:

$$n = n_i \exp\left[\frac{E_F - E_{Fi}}{k_B T}\right] \quad \text{و} \quad p = n_i \exp\left[-\frac{(E_F - E_{Fi})}{k_B T}\right] \quad (۲۹-۳)$$

بنابراین وقتی نیمرسانایی نوع n (یا نوع p) باشد، تراز فرمی به مرور به سمت لبه ی نوار رسانش (یا ظرفیت) نزدیک می شود.

1- Intrinsic concentration



شکل (۳-۵): تابع چگالی حالت، تابع احتمال فرمی - دیراک و نمایش نواحی تراکم الکترون و حفره

وقتی که تراز فرمی پایینتر از وسط گاف نواری قرار دارد [۱۴].

در مواردی که مقدار $E_C - E_F$ در حدود $k_B T$ یا کمتر باشد، تقریب ماکسول - بولتزمن از دقت کافی برخوردار نیست و عبارت ساده‌ی مرتبط با چگالی حامل در رابطه‌ی (۳-۲۵) را می‌توان با تغییر متغیرهای زیر حل کرد:

$$\eta = \frac{E - E_C}{k_B T} \quad \text{و} \quad \eta_F = \frac{E_F - E_C}{k_B T} \quad (۳-۳۰)$$

بدین ترتیب خواهیم داشت:

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\eta^{1/2} d\eta}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} \quad (۳-۳۱)$$

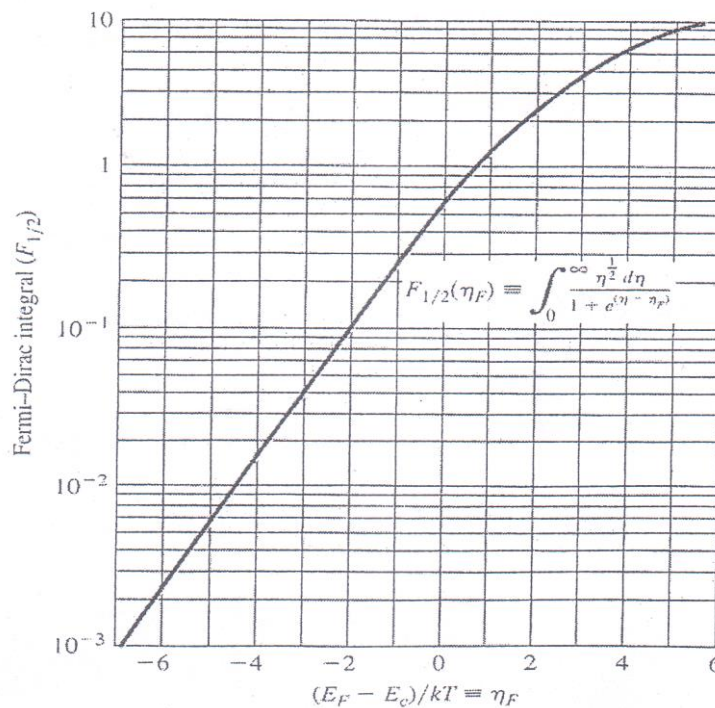
عبارت انتگرالی به انتگرال فرمی - دیراک موسوم است که به صورت زیر نمایش داده می‌شود:

$$F_{\frac{1}{2}}(\eta_F) = \int_0^{\infty} \frac{\eta^{1/2} d\eta}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} \quad (32-3)$$

که با توجه تعریف چگالی مؤثر حالتها N_C داریم:

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C F_{\frac{1}{2}}(\eta_F) \quad (33-3)$$

مقادیر انتگرال فرمی - دیراک در شکل (۶-۳) رسم شده است که در محاسبات می‌توان از آن استفاده کرد. برای حفره‌ها نیز می‌توان تراکم آنها (p) را بطور مشابه بدست آورد.



شکل (۶-۳): انتگرال فرمی - دیراک $f_{1/2}$ به صورت تابعی از انرژی فرمی [۱۴]

۳-۲-۵- معادلات مربوط به خنثایی بار و تراکم الکترونها و حفره‌ها

در یک نیم‌رسانا با ناخالصی‌های بخشنده و پذیرنده، معادله‌ی خنثایی بار به صورت زیر خواهد بود [۱۵]:

$$n + N_a^- = p + N_d^+ \quad (3-34)$$

که N_d^+ و N_a^- به ترتیب چگالی ناخالصیهای پذیرنده و بخشنده‌ی یونیده هستند. اگر نیم‌رسانای مورد بررسی نوع n باشد، می‌توان نوشت [۱۵]:

$$2n = (N_d^+ - N_a^-) + \left[(N_d^+ - N_a^-)^2 + 4n_i^2 \right]^{1/2} \quad (3-35)$$

در صورتی که در دمای مورد نظر تراکم حامل ذاتی در نمونه‌ی مورد بررسی بسیار کوچک باشد می‌توان از آن در معادله‌ی فوق صرف نظر کرد که در این صورت خواهیم داشت: $n = N_d^+ - N_a^-$. با در نظر داشتن رابطه $n = N_C \exp\left[-\frac{(E_C - E_F)}{k_B T}\right]$ و همچنین رابطه‌ی بین بخشنده‌های یونیده و تراکم بخشنده‌ی کل به صورت زیر [۸]:

$$\frac{N_d^+}{N_d} = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g} \exp[(E_d - E_F)/k_B T]} \quad (3-36)$$

و با انجام اندکی عملیات جبری بر روی رابطه‌ی (۳-۳۳) خواهیم داشت:

$$\frac{N_d^+}{N_d} = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g} \exp[(E_d - E_F)/k_B T] \exp[(E_C - E_F)/k_B T]} \quad (3-37)$$

بدین ترتیب برای یک نیم‌رسانای نوع n ، تراکم الکترونی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$n(T) = \frac{N_d}{1 + \frac{n(T)g}{N_C(T)} \exp(\Delta E_d / k_B T)} - N_a \quad (3-38)$$

در روابط فوق ΔE_d انرژی فعالسازی^۱ ناخالصیها و g فاکتور تبهگنی است.

- [1]- J. Singh, " Semiconductor Optoelectronic ", Mc-Graw Hill (1995).
- [2]- H. Brooks, Adv. Electron. Phys. **7**, 85 (1995).
- [3]- H. Markoc, " Nitride Semiconductors and Devices ", Springer Verlag Berlin Heidelberg, New York (1999).
- [4]- D. C. Look, " Electrical characterization of GaAs Materials and Devices ", John Wiley & Sons (1989).
- [5]- W. Shockley, " Electron, Hole in Semiconductors ", Van no strand. Princeton, NJ (1950).
- [6]- H. Ehrenreich, J. Phys. Chem. Solid. **8**, 130 (1959).
- [7]- S. A. Choulis, *et al.* Phys. Rev. B. **66**, 163321 (2002).
- [8]- C. M. Wolf, N. Holonyak, JR, G. E. Stillman, " Physical Properties of Semiconductors ", Prentice Hall (1989).
- [9]- Erginosy, " Nuetral Impurities Scattering in Semiconductors ", Phys. Rev. **79**, 1013 (1950).
- [10]- B. Podor, Phys. Stat. sol. **16**, 197 (1966).
- [11]- S. Fahy, A. Lindsay, E. P. O'Reily, " Theory of electron mobility in dilute nitride semiconductors ", NMRC And Department of Physics, University College Cork, Irland (2004).
- [12]- R. A. Serway, " Physics for scientists and Engineers ", Saunders College Publishing Toronto (1992).
- [13]- E. Strom, " Optical and Electrical Properties of dilute $\text{GaN}_x\text{AS}_{1-x}$ Alloys ", MS Thesis, B. Sc Mc Master University (1999).
- [14]- D. A. Neaman, " Semiconductor Physics and Devices ", Third Edition, Mc-Graw Hill (2003).
- [15]- H. Nakamaya, P. Hack, *et al.* Jpn. K. Appl. Phys. **35**, L283 (1996)

فصل چهارم

بررسی نظری داده‌های تجربی

از اواسط دهه‌ی ۱۹۹۰ گزارشاتی مبتنی بر خواص ترابری الکتریکی نیمرساناهای نیتروژندار رقیق شامل ترکیبات سه‌تایی $GaNAs$ و ترکیبات چهارتایی $InGaNA$ و $AlGaNA$ ارائه شده است [۱]. البته در انواع ترکیبات چهارتایی علاوه بر نیتروژن، از عناصر گروه سوم جدول تناوبی (In ، Al و ...) نیز به میزان کم جایگزین اتمهای گالیوم در شبکه‌ی بلوری می‌شوند.

هدف ما در این فصل بررسی خواص ترابری الکتریکی در نیمرساناهای نیتروژندار رقیق با ترکیب سه‌تایی GaN_xAs_{1-x} و ترکیبات چهارتایی $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ و $Al_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ است. مطالعه‌ی ما شامل بررسی تغییرات تراکم الکترونی در نمونه‌های سه‌تایی با مقادیر متفاوت N در دمای اتاق می‌باشد که به تحلیل دلایل این تغییرات نیز خواهیم پرداخت. سپس داده‌های تجربی مربوط به تحرک الکترونی این ترکیبات را بر حسب تابعی از دما مورد بحث قرار خواهیم داد. آنگاه تأثیر افزوده شدن عناصر سه ظرفیتی مانند In و Al را بر خواص الکتریکی لایه‌های رشد یافته مطالعه خواهیم کرد.

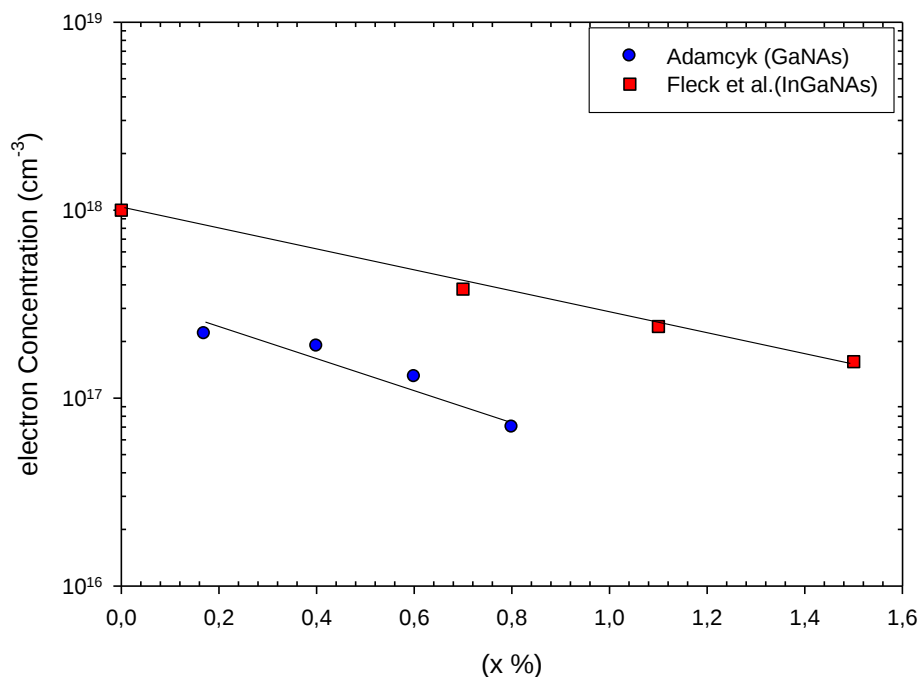
۴-۱- بستگی تراکم الکترونی در مواد نیتروژندار رقیق $GaNAs$ و $InGaNA$ به مقدار

کسر مولی نیتروژن (x) در دمای اتاق

یکی از کمیت‌های مهم در مطالعه‌ی خواص ترابری الکتریکی یک نیمرسانا، تراکم الکترونی آن است. این کمیت تا حد زیادی تحت تأثیر عواملی همچون تراکم ناخالصیها و نقایص بلوری در نمونه می‌باشد. شکل (۴-۱) تغییرات تراکم حاملها در نمونه‌های GaN_xAs_{1-x} و $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-y}$ ، به ترتیب مربوط به آدامسیک [۶] (دایره‌ها) همچنین فلک و همکاران [۷] (مربع‌ها) را نشان می‌دهد.

نمونه‌های معرفی شده در بالا با اتمهای Si آلاینده شده‌اند و به روش MBE بر روی زیر لایه‌ی GaAs رشد یافته‌اند. دمای رشد نمونه‌های آدامسیک ۴۶۰ درجه سانتیگراد و تراکم آلاینش در آنها حدود $N_d = 6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ است و این در حالیست که دمای رشد نمونه‌های فلک ۵۱۵ درجه سانتیگراد بوده و تراکم ناخالصی در آنها در حدود $N_d = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ می‌باشد.

همانگونه که پیداست هم در گروه نمونه‌های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ و هم $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}_x\text{As}_{1-x}$ با افزایش درصد نیتروژن تراکم الکترونهای رسانشی در دمای اتاق کاهش می‌یابد. این کاهش، بنا به گزارش محققین یاد شده به تشکیل ترازهای تله‌های به دام اندازنده‌ی الکترونی در گاف نواری نسبت داده می‌شود [۷و۶].



شکل (۱-۴): تغییرات تراکم حاملها در نمونه‌های [۶]GaNAs و [۷]InGaAs بر حسب درصد مولی N

به منظور تحقیق در این مورد و تعیین کمی تراکم ترازهای مربوط به تله‌ها در این نمونه‌ها می‌توان از معادله‌ی خنثایی بار در ماده به صورت:

$$N_d = N_d f_d + N_t f_t + n \quad (۱-۴)$$

استفاده کرد که در آن N_d و N_t به ترتیب تراکم اتمهای بخشنده و مراکز تله و همچنین f_t و f_d به ترتیب احتمال اشغال ترازهای بخشنده و ترازهای تله می‌باشند. در این رابطه n تراکم الکترونها در نوار رسانش است که از طریق اندازه‌گیری اثر هال به دست می‌آید. به منظور اطلاع از f_t و f_d لازم است که از موقعیت تراز فرمی مطلع باشیم. از آنجا که برای یک تراز انرژی دلخواه بر اساس آمار فرمی - دیراک داریم:

$$f(E_x) = \frac{1}{1 + g \exp\left(\frac{E_x - E_f}{kT}\right)} \quad (2-4)$$

که در آن E_f تراز فرمی و g عامل واگنی است، به طوری که برای حالت‌های بخشنده، g برابر 0.5 است [۶] و از آنجا که طبیعت ناراستی‌های مربوط به نیتروژن کاملاً مشخص نیست، مقدار g برای این ترازهای به دام اندازنده برابر واحد فرض می‌شود [۶]. با معلوم بودن n در دمای اتاق برای هر نمونه، می‌توان از رابطه‌ی (۳-۲۶) با نوار رسانش به عنوان تراز مرجع استفاده نمود و موقعیت تراز فرمی (E_f) را پیدا کرد. با به کارگیری این روش برای یکی از نمونه‌های آدامسیک، شکل (۴-۱)، مثلاً GaN_xAs_{1-x} با $x = 0.1\%$ و $n = 7 \times 10^{16} cm^{-3}$ به ازای $N_c = 7 \times 10^{17} cm^{-3}$ موقعیت تراز فرمی برابر $E_f = -60.23 meV$ خواهد بود. همچنین در یکی از نمونه‌های فلک و همکاران با $x = 1/5\%$ و $y = 3x$ و به ازای $n = 1/56 \times 10^{17} cm^{-3}$ ، $N_c = 8 \times 10^{17} cm^{-3}$ موقعیت تراز فرمی $E_f = -43.25 meV$ پایینتر از لبه‌ی نوار رسانش خواهد بود. لازم به توجه است که علت متفاوت بودن مقدار N_c در این دو ترکیب بندی در تفاوت مقدار جرم مؤثر الکترون در این نمونه‌هاست. مقدار جرم مؤثر در این دو گروه از نمونه‌ها از مدل BAC گرفته شده است. حال با معلوم شدن E_f برای هر نمونه و با فرض $E_d = -5/8 meV$ [۸] (موقعیت تراز ناخالصی Si در شبکه‌ی GaAs) در رابطه (۴-۲)، f_d احتمال اشغال تراز ناخالصی را به دست می‌آوریم. مقدار این احتمال در نمونه‌ی GaN_xAs_{1-x} ($x: 0.1\%$) و در نمونه‌ی $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ ($x: 1/4\%$ و $y: 3x$) 0.19 و 0.32 بدست آمده است. مطابق اندازه‌گیری‌های کاپلر و همکاران [۹] در سیستم GaN_xAs_{1-x} تراز تله‌ی الکترونی در این نمونه‌ها در انرژی حدود $0.36 eV$ زیر نوار رسانش واقع است. محل این تراز در سیستم $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ بر طبق گزارش فلک، $0.75 eV$ زیر نوار رسانش است، که این بیانگر عمیق‌تر بودن تراز تله‌ها در GaN_xAs_{1-x} می‌باشد. ما برای یافتن تراکم ترازهای تله با استفاده

مجدد از رابطه (۲-۴) و موقعیت تراز فرمی که در هر نمونه قبلاً پیدا شده است، احتمال اشغال این تراز یعنی f_t را محاسبه کرده‌ایم. این احتمال برای GaN_xAs_{1-x} ، مقدار ۰/۹۹ و برای $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ بدست می‌آید. با قرار دادن تمامی این مقادیر بدست آمده در رابطه‌ی (۱-۴)، چگالی ترازهای تله‌ای (N_t)، برای نمونه‌ی بدون ایندیوم (GaN_xAs_{1-x}) آدامسیک برابر $۴/۶ \times ۱۰^{۱۷} cm^{-3}$ و برای نمونه‌ی ایندیوم‌دار فلک، $۶/۶ \times ۱۰^{۱۷} cm^{-3}$ بدست می‌آید. مشابه این محاسبات را می‌توان برای سایر مقادیر x نیز تکرار نمود. نتایج مربوط به این محاسبات در جداول (۱-۴) و (۲-۴) ارائه شده‌اند.

جدول (۱-۴): محاسبات مربوط به تراکم تله‌ها در نمونه‌های آدامسیک [۶]

GaN_xAs_{1-x}	$n(cm^{-3})$	$E_f (meV)$	$N_t (cm^{-3})$
$x = ۰/۱۷\%$	$۲/۲ \times ۱۰^{۱۷}$	-۲۱/۵	$۶/۶ \times ۱۰^{۱۶}$
$x = ۰/۴\%$	$۰/۹ \times ۱۰^{۱۷}$	-۲۶/۵	$۲/۱ \times ۱۰^{۱۷}$
$x = ۰/۸\%$	۷×۱۰^{۱۶}	-۶۰/۲۳	$۴/۶ \times ۱۰^{۱۷}$

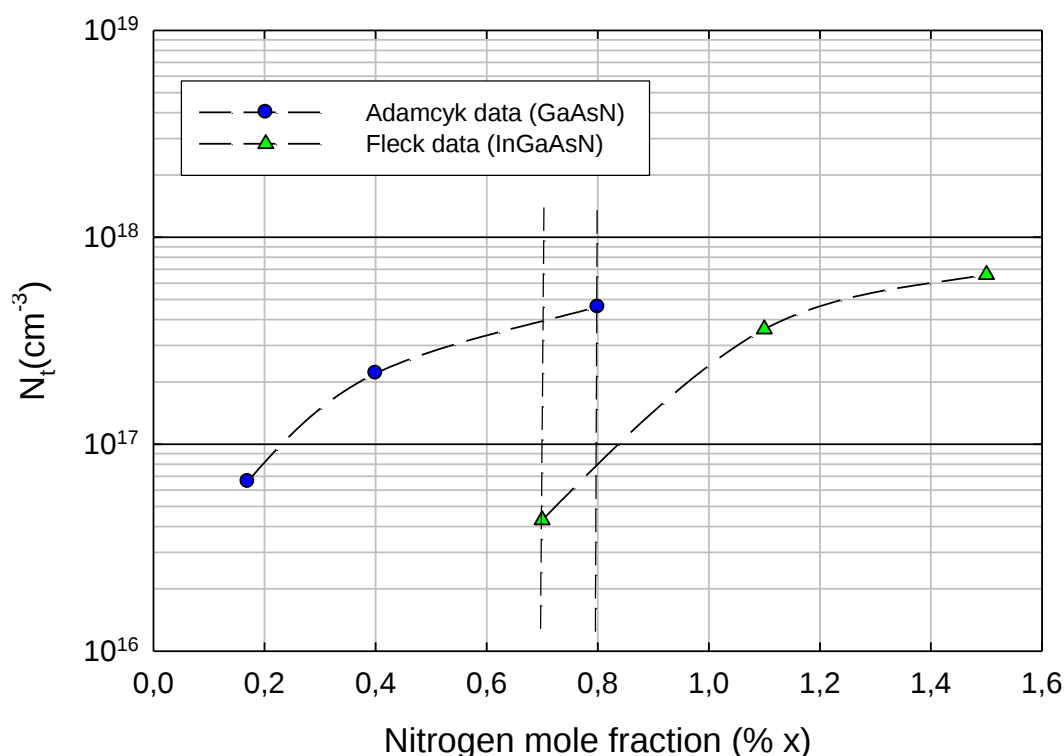
جدول (۲-۴): محاسبات مربوط به تراکم تله‌ها در نمونه‌های فلک [۷]

$In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ ($y = 3x$)	$n(cm^{-3})$	$E_f (meV)$	$N_t (cm^{-3})$
$x = ۰/۷\%$	$۳/۸ \times ۱۰^{۱۷}$	-۱۵/۷۸	$۴/۳ \times ۱۰^{۱۶}$
$x = ۱/۱\%$	$۲/۴ \times ۱۰^{۱۷}$	-۲۹/۴۴	$۳/۶ \times ۱۰^{۱۷}$
$x = ۱/۵\%$	$۱/۵۶ \times ۱۰^{۱۷}$	-۴۳/۲۵	$۶/۶ \times ۱۰^{۱۷}$

چنانچه از این نتایج پیداست، تراکم N_t در هر دو گروه (با و بدون ایندیوم) با افزایش تراکم نیتروژن، افزایش یافته است.

به منظور سهولت بیشتر، شکل (۲-۴) نمودار تغییرات چگالی ترازهای به دام اندازنده‌ی الکترونی را بر حسب کسر مولی نیتروژن (x) که حاصل محاسبات فوق است، نشان می‌دهد. از نکات قابل

ذکر در این دو گروه از نمونه‌ها اینکه: (الف) در بازه مشترک $0.07 \leq x \leq 0.18$ (حد فاصل بین خط چین‌های قائم در شکل (۴-۲)) تراکم N_t در نمونه‌های ایندیوم‌دار کاهشی در حدود ۵ تا ۶ برابر در مقایسه با نمونه‌های بدون In داشته‌اند که این می‌تواند دلیلی بر کیفیت بالاتر در این نمونه‌ها (ایندیوم‌دار) باشد. (ب) چنین به نظر می‌رسد که با افزایش x در هر دو گروه، تراکم ترازهای تله‌ای به یک مقدار اشباعی در حدود 10^{18} cm^{-3} میل می‌کند.



شکل (۴-۲): نمودار مربوط به تغییرات تراکم تله‌های الکترونی در نمونه‌های آدامسیک و فلک [۷۶]

از آنجا که بررسی‌های ما در این بخش تنها منحصر به بررسی تراکم الکترونی در دمای اتاق بوده‌اند، همانگونه که در ادامه‌ی بحث شاهد خواهیم بود، تحلیل داده‌های تجربی وابسته به تغییرات تحرک الکترونی بر حسب تابعی از دما نیز می‌تواند به اطلاعات مهمی از این مواد نیم‌رسانا منجر شود.

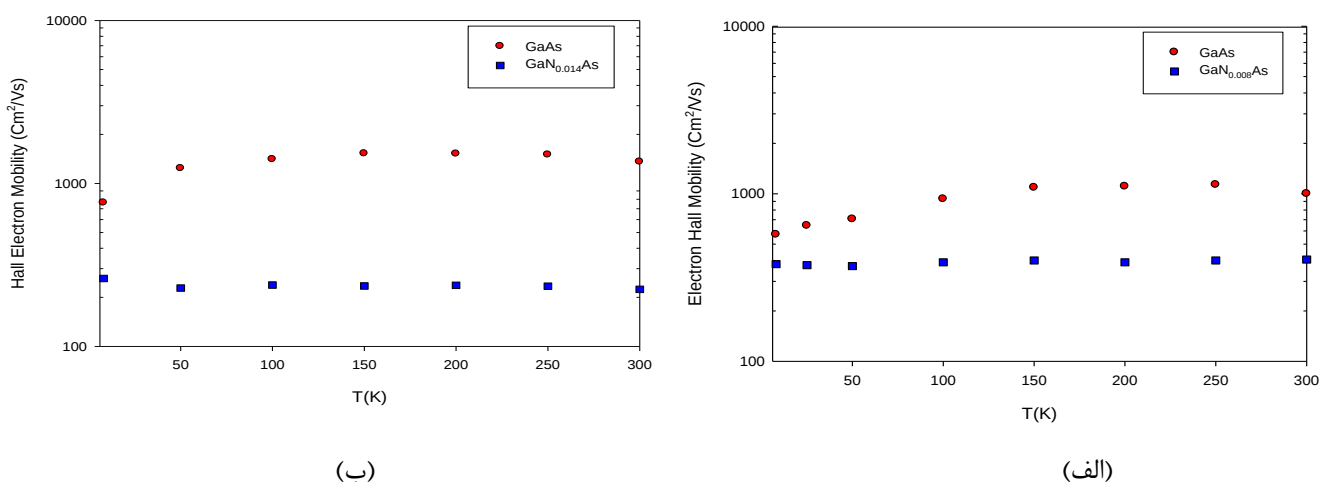
۲-۴- بررسی وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه‌های $InGaAs$ ، $GaNAs$ و

$AlGaAs$

در این بخش سعی کرده‌ایم تا با در نظر گرفتن مهم‌ترین سازوکارهای پراکندگی که پیشتر در فصل (۳) معرفی شده‌اند، داده‌های تجربی وابسته به تحرک الکترونی، که می‌تواند محکی از کیفیت ساختاری نمونه‌های بلوری مورد بحث باشد، را مورد بررسی قرار دهیم.

۲-۴-۱- تأثیر نیتروژن بر تحرک الکترونی در نمونه‌های $GaNAs$ با مقدار نیتروژن متفاوت

مطابق آنچه گفته شد، اضافه کردن نیتروژن به مقدار بسیار کم به شبکه‌ی بلوری $GaAs$ به کاهش کیفیت ساختاری بلوری نمونه‌ها منجر می‌گردد و در نهایت از تحرک الکترونی آنها می‌کاهد. شکل (۳-۴-الف و ب) وابستگی تحرک الکترونی دو نمونه را که حاوی مقادیر متفاوتی از نیتروژن می‌باشند، یکی به میزان $x = 0.1\%$ و دیگری به میزان $x = 1.4\%$ ، به همراه داده‌های تجربی وابسته به لایه‌ی $GaAs$ که در همان شرایط و بدون نیتروژن رشد یافته است، نشان می‌دهد. چنانچه پیداست نمونه‌های $GaAs$ رفتاری شبیه به یکدیگر دارند، لکن با افزودن N به آن تحرک الکترونی کاهش قابل ملاحظه‌ای پیدا کرده است. داده‌های تجربی حاکی از آن است که نمونه‌ی با کسر مولی نیتروژن بیشتر، از تحرک حاملی پایینتری برخوردار است. به منظور علت‌یابی این مشاهدات نخست به تحلیل نمونه‌ی سوزوکی شکل (۳-۴-الف) و سپس نمونه‌ی هاشیموتو شکل (۳-۴-ب) می‌پردازیم.



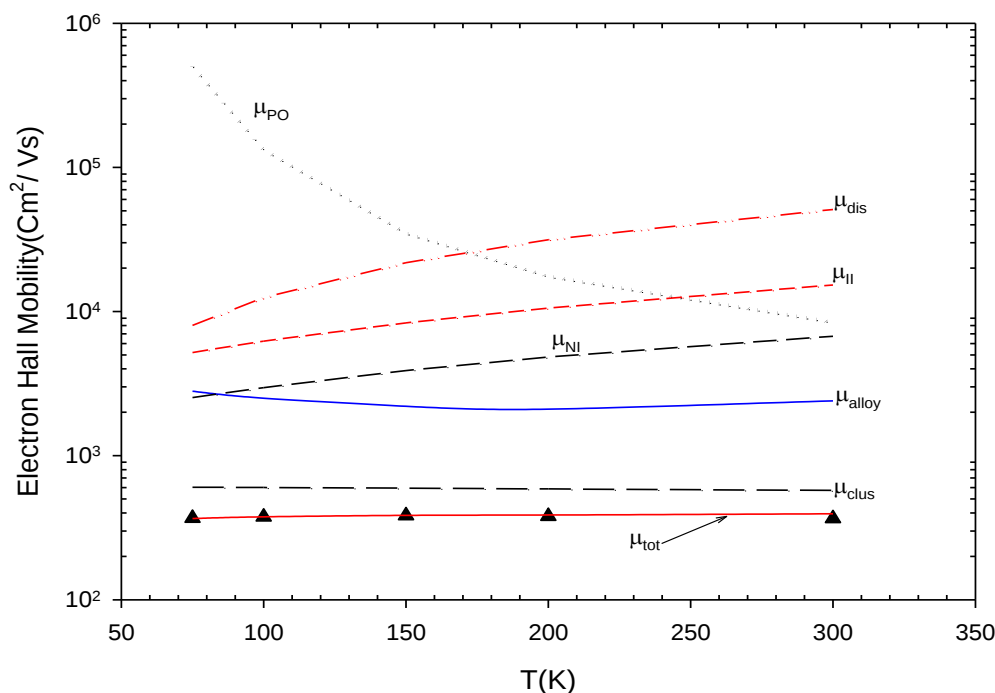
شکل (۳-۴): داده‌های تجربی نمونه‌های $GaAs$ و $GaNAs$ مربوط به (الف): سوزوکی [۳] و (ب): هاشیموتو [۴].

چنانچه در فصل سوم بیان شد، تحرک حاملها در یک نیمرسانا متأثر از عوامل گوناگون پراکندگی (ذاتی و غیر ذاتی) است (بخش ۳-۱). در محاسبات مربوط به این پراکندگی‌ها از معادلات وابسته به هر کدام از آنها و اثر کلی آنها توسط قاعده‌ی ماتریس، معادله‌ی (۳-۲۰)، استفاده می‌شود. در مورد پراکندگی آلیاژ خوشه‌ای از محاسبات اوریلی و همکارانش [۹] که در دماهای ۳۰ و ۳۰۰ درجه‌ی کلون انجام گرفته است (بخش ۳-۱-۸)، با فرض یک رابطه‌ی خطی بین تحرک حاملی و دما در این بازه‌ی دمایی به ازای یک x خاص استفاده کرده‌ایم. همچنین برای گنجاندن اثر پراکندگی آلیاژ کتره‌ای نیز از نتایج محاسبات نظری این گروه پژوهشی (بخش ۳-۱-۷) بهره برده‌ایم که شامل رفتار دمایی این پراکندگی در x های مختلف می‌باشد. برای یافتن اثر پراکندگی ناخالصی‌های یونیده و خنثی از کمیت‌های برازشی شامل چگالی ترازهای ناخالصی‌ها (N_d)، انرژی فعالسازی آنها (E_d) و ضریب جبران $\left(\phi = \frac{N_a}{N_d}\right)$ در معادله‌ی خنثایی بار (معادله‌ی ۳-۳۸) استفاده کرده‌ایم. در تحلیل داده‌های وابسته به تحرک الکترونی، علاوه بر سازوکارهای ذاتی که رفتارشان تابع ثابتهای مادی نمونه است و سازوکارهای غیر ذاتی شامل پراکندگی از ناخالصیهای یونیده و خنثی، که با مقادیر N_d ، E_d و ϕ وابسته‌اند، پراکندگی مربوط به دررفتگیها نیز بایستی در نظر گرفته شود. در این مکانیزم کمیت برازشی ما تراکم دررفتگی سطحی (N_{dis}) است. لازم به ذکر است که یکی از کمیت‌های بسیار مهم در این محاسبات، جرم مؤثر الکترون در نمونه‌ی مورد نظر (با تراکم نیتروژن داده شده) می‌باشد. در این مورد از مقادیر پیش بینی شده در نظریه BAC (شکل ۲-۶) کمک گرفته‌ایم که مقدار آن به ازای $x = 0.08\%$ ، $m^* = 0.094 m_0$ و به ازای $x = 1.4\%$ ، $m^* = 0.097 m_0$ بدست می‌آید. شکل (۴-۴) نتیجه‌ی جزئیات محاسبات را که شامل اثر هر کدام از سازوکارها به طور جداگانه و نیز اثر کلی آنهاست، نشان می‌دهد. مقادیر برازشی برای این نمونه در جدول (۴-۳) آمده است.

جدول (۳-۴): پارامترهای برآزشی محاسبه شده در نمونه GaNAs سوزوکی و همکاران [۳]

GaN_xAs_{1-x}	$N_{dis}(m^{-2})$	$N_d(cm^{-3})$	$E_d(meV)$	ϕ
$x = 0.18\%$	$1/1 \times 10^{13}$	1×10^{17}	۸	۰.۴۰

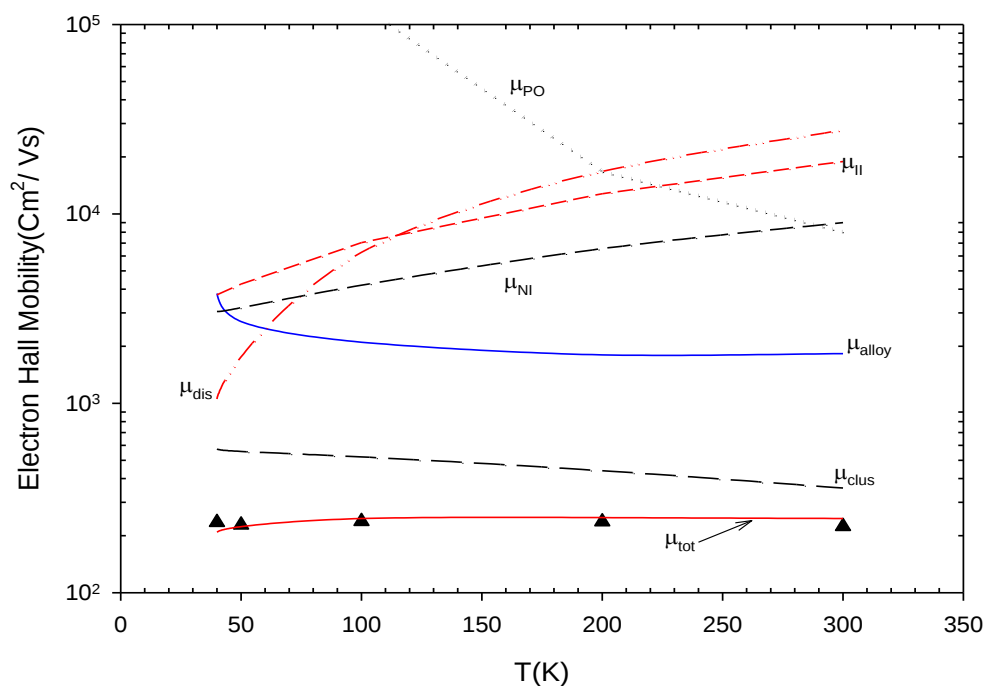
چنانچه از نتیجه‌ی محاسبات در این شکل پیداست انطباق بسیار خوبی بین μ_{tot} نظری و داده‌های تجربی گزارش شده وجود دارد. نکات جالب توجه در این تحلیل آنکه (الف): تحرک الکترونی در کل بازه‌ی دمایی ۷۰ تا ۳۰۰ درجه کلوین تغییرات بسیار ناچیزی داشته و تقریباً ثابت است. چنانچه در نمونه‌های با کیفیت بالا مشاهده شد، در دماهای بالا معمولاً پراکندگی فونونی غالب است، اما در این نمونه‌ها به علت تأثیر قوی پراکندگی‌های آلیاژی، به ویژه آلیاژ خوشه‌ای، این سازوکار حتی در دمای اتاق نیز اثر چندانی بر تحرک الکترونی ندارد. (ب): در محدوده‌ی دماهای پایین مشاهده می‌شود که علاوه بر پراکندگی مربوط به ناخالصی‌ها (یونیده و خنثی) و دررفتگی‌های بلوری، پراکندگی وابسته به آلیاژ خوشه‌ای همچنان به عنوان عامل اصلی در کنترل تحرک الکترونی به شمار می‌آید. (ج): تحرک الکترونی در کل بازه‌ی دمایی ۷۰ تا ۳۰۰ درجه کلوین که تقریباً ثابت می‌باشد، عمدتاً توسط سازوکار آلیاژ خوشه‌ای محدود شده است.



شکل (۴-۴): نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تحرک الکترونی

در نمونه‌ی $\text{GaN}_{0.008}\text{As}_{0.992}$ سوزوکی و همکاران [۳].

در مورد داده‌های تجربی مربوط به نمونه هاشیموتو و همکاران [۴] نیز محاسباتی شبیه به نمونه‌ی سوزوکی انجام داده‌ایم که جزئیات آن در شکل (۴-۵) و مقادیر برازشی وابسته به آن در جدول (۴-۴) آمده است. همانگونه که پیداست، در این نمونه هم مانند نمونه‌ی قبلی پراکندگی آلیاژ خوشه‌ای سازوکار اصلی در کنترل تحرک الکترونی است و در مقایسه با نمونه‌ی سوزوکی به مقداری حدود دو برابر آن افزایش یافته است. این موضوع می‌تواند با توجه به اختلاف نزدیک به دو برابری مقدار کسر مولی نیتروژن در این دو نمونه مرتبط باشد. همچنین از مقایسه‌ی پارامترهای برازشی در جداول (۳-۴) و (۴-۴) می‌توان دریافت که اگرچه مقادیر N_d ، E_d و ϕ در این دو نمونه تقریباً به یکدیگر نزدیک هستند، مقدار تراکم دررفتگی‌ها در نمونه‌ی با نیتروژن بالاتر حدود ۲۰ درصد بیشتر از نمونه‌ی دیگر است. این نتیجه گیری با توجه به گزارشات [۱۳ و ۱۴] در خصوص نحوه‌ی توزیع اتمهای N در GaNAs ، حاکی از وجود پیوندهای $\text{Ga}-N$ بوده و بخاطر اختلاف بین طول پیوندهای GaAs (۲/۴۵ Å) و GaN (۱/۹۶ Å) می‌تواند سبب تشکیل کرنشهایی در این ماده باشد.



شکل (۴-۵): نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تحرک الکترونی

در نمونه ی $\text{GaN}_{0.014}\text{As}_{0.986}$ هاشیموتو و همکاران [۴].

از مقایسه ی این نتایج با مقادیر کمیت های برازشی نمونه ی سوزوکی جدول (۴-۳) ملاحظه می شود که تراکم دررفتگی سطحی در نمونه ی با ترکیب نیتروژن بیشتر حدود ۱۸٪ افزایش یافته است، که این می تواند ناشی از کاهش کیفیت بلوری نمونه با افزایش N در ترکیب باشد.

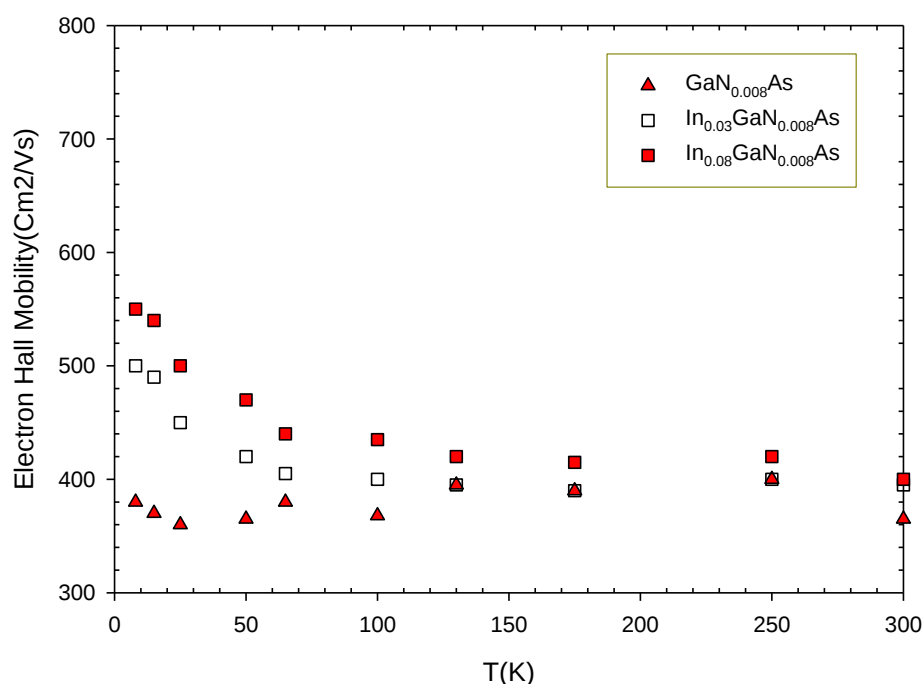
جدول (۴-۴): پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی $\text{GaN}_{0.014}\text{As}_{0.986}$ [۴]

$\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$	$N_{dis} (m^{-2})$	$N_d (cm^{-3})$	$E_d (meV)$	ϕ
$x = ۱/۴\%$	$۱/۳ \times ۱۰^{۱۳}$	$۰/۸ \times ۱۰^{۱۷}$	۱۰	۰/۴۵

نتیجه آنکه با توجه به محاسبات دریافتیم افزایش کسر مولی نیتروژن از $x = ۰/۸\%$ به $x = ۱/۴\%$ نه تنها به افزایش تراکم دررفتگیهای بلوری ماده در حدود ۲۰ درصد می انجامد، بلکه همچنین باعث افزایش قدرت پراکندگی آلیاژ خوشه ای پیوندهای $Ga-N$ ، تا حدود دو برابر می گردد.

۴-۲-۲- تأثیر حضور ایندیوم بر تحرک الکترونی در $GaNAs$ (نمونه‌های $InGaNaS$)

در بخش قبل به بررسی تأثیر حضور نیتروژن در شبکه‌ی بلوری $GaAs$ که منجر به تشکیل نمونه‌های $GaNAs$ گردید پرداختیم. همانطور که ملاحظه شد با افزایش تراکم نیتروژن در ترکیب مورد نظر، کاهش قابل ملاحظه‌ای در کیفیت بلوری ماده ایجاد می‌شود که نتیجه‌ی آن کاهش تحرک الکترونی است. اکنون در این بخش به مطالعه‌ی خواص ترابری الکتریکی ماده در صورت افزوده شدن ایندیوم به این ترکیب می‌پردازیم. شکل (۴-۶) داده‌های تجربی مربوط به بستگی دمایی تحرک الکترونی دو نمونه‌ی $InGaNaS$ یکی با کسر مولی ایندیوم ۳٪ و دیگری ۸٪ را همراه با نمونه‌ی بدون ایندیوم که هر سه از مقدار نیتروژن یکسان برخوردارند نشان می‌دهد [۳].



شکل (۴-۶): داده‌های تجربی تحرک الکترونی مربوط به نمونه‌های سوزوکی [۳]

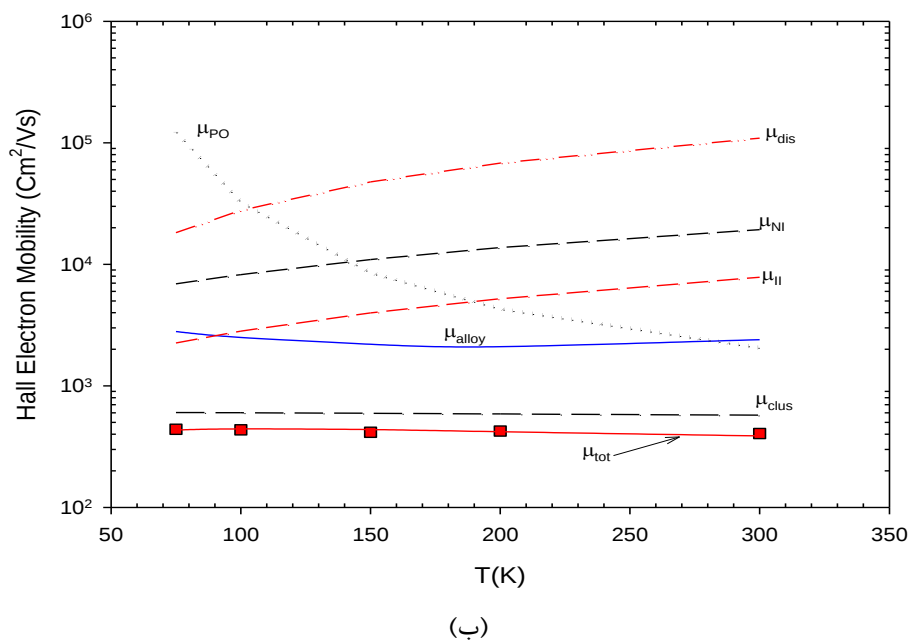
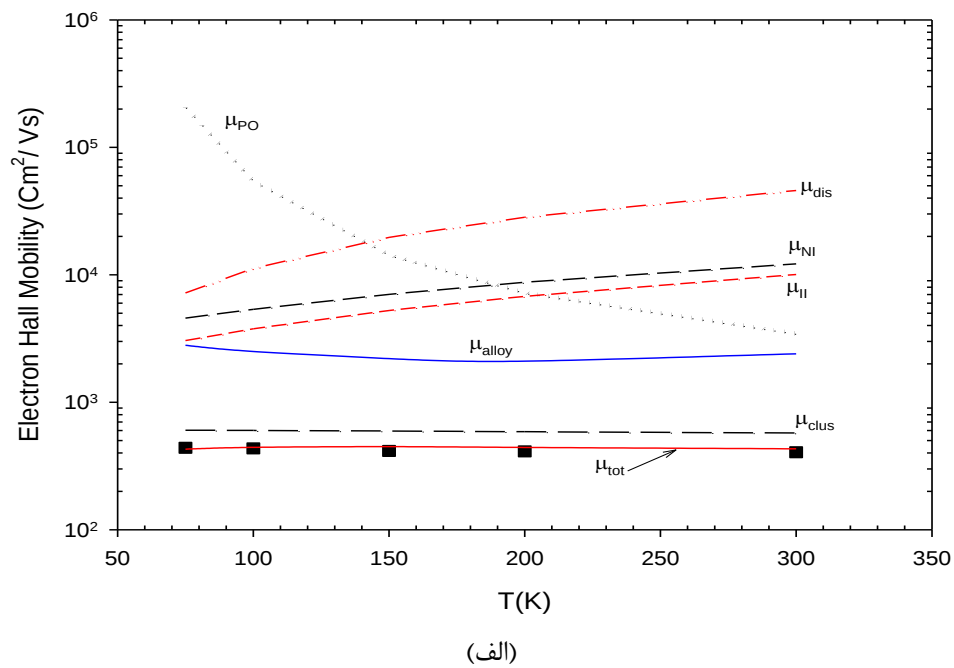
چنانچه پیداست با اضافه شدن ایندیوم روند رو به افزایش برای تحرک الکترونی در تمامی گستره‌ی دمایی به ویژه محدوده‌ی دماهای پایین حاصل می‌شود. این اثر، چنانچه سوزوکی و همکاران [۳] بر این باورند، می‌تواند ناشی از کم شدن پیوندهای خوشه‌ای $Ga-N$ بر اثر زیاد شدن

پیوندهای کتره‌ای $In-N$ باشد. هدف ما در این بحث تحلیل کمی این داده‌ها و تفسیر دقیقتری از این رفتار است. از آنجا که قبلاً نمونه‌ی بدون ایندیوم $GaN_{0.008}As$ را مورد تحلیل کامل قرار داده-ایم، جدول (۳-۴) و شکل (۴-۴)، در این مرحله تنها به مطالعه‌ی نمونه‌های ایندیوم‌دار می‌پردازیم. در انجام محاسبات از آنجا که مقدار In افزوده شده کمتر از ۱۰ درصد می‌باشد با تقریب خوبی می‌توان از ثابتهای مادی وابسته به $GaAs$ ، نظیر ثابتهای دی الکتریک بسامد پایین و بالا، ثابت پیزوالکتریک و.... استفاده کرد [۱۲]. جرم مؤثر بکار گرفته شده برای حاملهای الکترونی در این نمونه‌ها، از مقادیر $0.24 m_0$ و $0.17 m_0$ به ترتیب برای نمونه‌های با $y = 8\%$ و $y = 3\%$ استفاده کرده‌ایم [۱۱]. به دلیل یکسان بودن کسر مولی نیتروژن در این نمونه‌ها، می‌توان سهم پراکندگی آلیاژ کتره‌ای وابسته به اتمهای نیتروژن را مشابه در نظر گرفت [۴]. کمیت‌های برازشی بدست آمده از این تحلیل در جدول (۴-۵) و جزئیات نحوه‌ی بستگی دمایی مربوط به هر کدام از سازوکارهای پراکندگی در هر یک از نمونه‌ها در شکل (۴-۷-الف و ب) نشان داده شده است.

جدول (۴-۵) : پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه‌های InGaNaS سوزوکی و همکاران [۳]

$In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$	$N_{dis}(m^{-2})$	$N_d(cm^{-3})$	$E_d(meV)$	ϕ
$x = 0.8\%$ $y = 3\%$	1×10^{13}	1×10^{17}	۸	۰/۴۰
$x = 0.8\%$ $y = 8\%$	0.6×10^{13}	1×10^{17}	۷	۰/۴۵

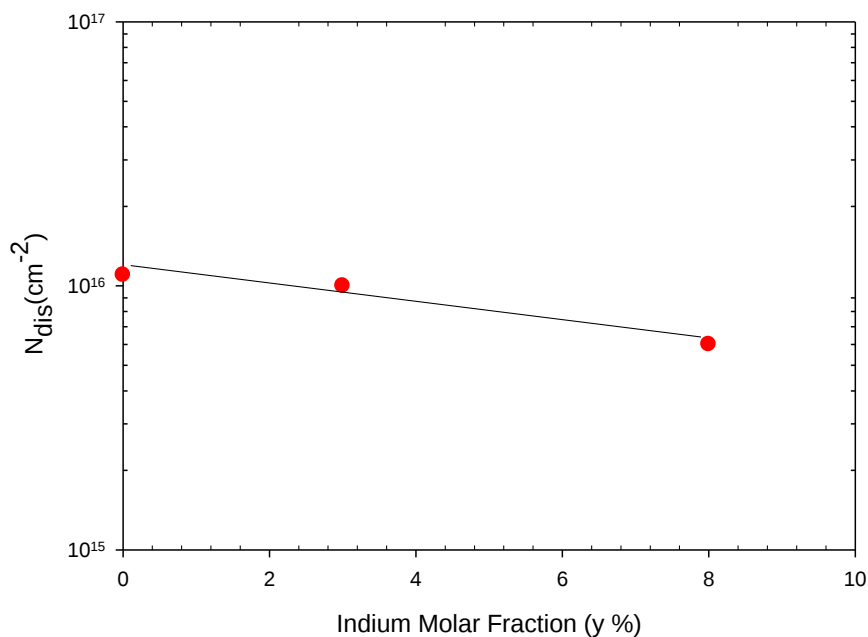
با توجه به نتایج بدست آمده از جدول (۴-۵) و مقایسه‌ی آن با مقادیر مربوط به $GaNAs$ ، جدول (۳-۴)، ملاحظه می‌شود که بجز در مقادیر دررفتگیهای بلوری که روند بخصوصی را نمایش می‌دهد،



شکل (۴-۷): نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه‌های

(الف) $\text{In}_{0.03}\text{Ga}_{0.97}\text{N}_{0.008}\text{As}_{0.992}$ و (ب) $\text{In}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}_{0.008}\text{As}_{0.992}$ [۳].

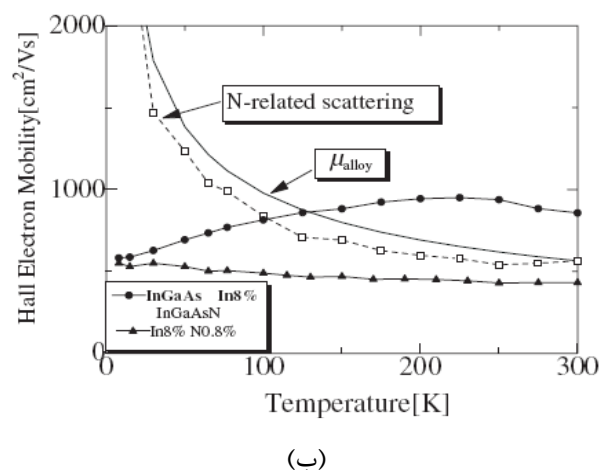
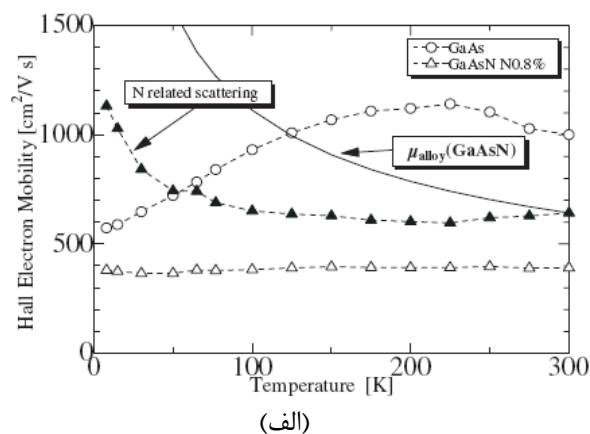
در سایر مقادیر برازشی تغییر محسوسی رخ نمی‌دهد. شکل (۸-۴) روند تغییرات سیستماتیک تراکم دررفتگیها را با اضافه شدن *In* نشان می‌دهد. چنانچه پیداست تغییرات N_{dis} برحسب کسر مولی *In* حاکی از آن است که با اضافه شدن ۸ درصد ایندیوم به *GaNAs*، تراکم دررفتگیها بلوری تا حدود نصف کاهش یافته است (شکل ۸-۴).



شکل (۸-۴): نمودار تغییرات تراکم دررفتگیها با درصد کسر مولی ایندیوم

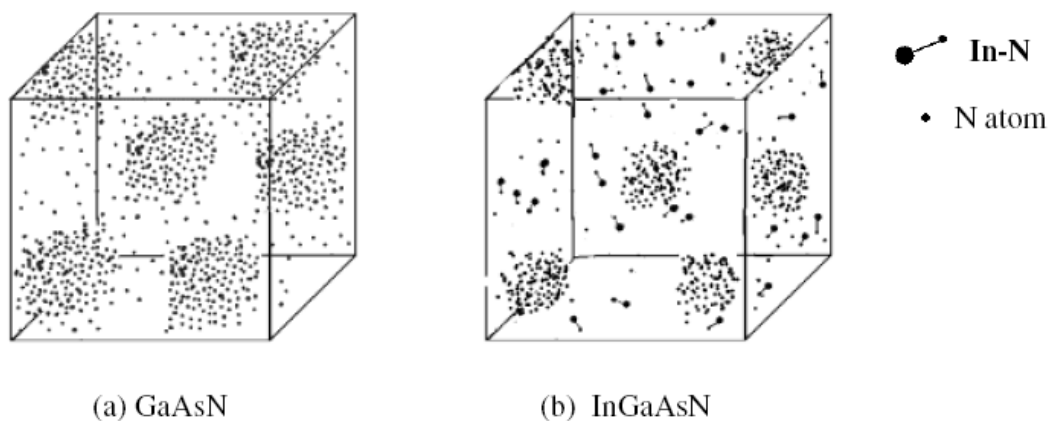
لازم به ذکر است که دستیابی به یک برازش مناسب در این نمونه‌ها تنها در صورتی امکان پذیر است که در معادله‌ی وابسته به قاعده‌ی ماتیسن، تحرک مربوط به آلیاژ خوشه‌ای (μ_{clus}) در نمونه‌های با ۳ و ۸ درصد ایندیوم با مضربهای ۱/۱ و ۱/۳ در نظر گرفته شود. این عمل به معنی تضعیف اثر پراکندگی به ترتیب به مقدار ۱۰ و ۳۰ درصد نسبت به نمونه‌ی بدون ایندیوم با درصد مولی نیتروژن یکسان می‌باشد. این نتیجه با شیوه به کارگرفته شده توسط سوزوکی و همکاران در توجیه افزایش تحرک الکترونی در این نمونه‌ها سازگار بوده، ضمن آنکه شیوه‌ی محاسبات کمی ما امکان مقایسه‌ی مقداری را برایمان فراهم می‌سازد. سوزوکی و همکاران [۳] با بهره‌گیری از داده‌های تجربی با استفاده از روشی دیگر که در ادامه آمده است به توصیف نقش N و *In* بر تحرک الکترونی پرداخته‌اند. در ادامه به بیان خلاصه‌ای از نتایج حاصل شده توسط این گروه خواهیم پرداخت.

شکل (۹-۴-الف) داده‌های مربوط به بستگی دمایی تحرک الکترونی نمونه‌های $GaNAs$ و $GaAs$ توسط سوزوکی و همکاران [۳] را نشان می‌دهد. در این شکل نمودار وابسته به مثلث‌های توپر نشانگر اختلاف بین تحرک در $GaNAs$ و $GaAs$ در هر دما می‌باشد که از قاعده‌ی ماتیسن به دست آمده است. این منحنی به سهم مربوط به اتمهای N نسبت داده شده است. علاوه بر این نمودار، خط پر تحرک محدود شده توسط توزیع کترهای اتمهای N را نشان می‌دهد. تفاوت بین این خط و نمودار مثلث‌های توپر حاکی از آن است که رفتار دمایی در $GaNAs$ را نمی‌توان تنها با پراکندگی وابسته به توزیع کترهای N توجیه نمود بلکه نوع دیگری از پراکندگی که به نحوی توزیع غیرکترهای اتمهای N مربوط می‌گردد نیز در کاهش تحرک تأثیر گذار است.



شکل (۹-۴): بررسی نظری سوزوکی در نمونه‌ی (الف) بدون In (ب) با In [۳]

شکل (۴-۹-ب) حاوی بررسیهایی مشابه شکل (۴-۹-الف) لکن در نمونه‌های $InGaAs$ و $InGaAsN$ می‌باشد. اختلاف تحرک مربوط به این دو نمونه در هر دما (نمودار مربع‌های تو خالی) و پراکندگی آلیاژ کتره‌ای می‌تواند ناشی از پراکندگی وابسته به اتمهای N با توزیع غیر کتره‌ای باشد. از مقایسه‌ی نمودارهای حاصل شده، توزیع کتره‌ای اتمهای نیتروژن به مراتب محتملتر از توزیع غیر کتره‌ای آنهاست. به بیان دیگر حضور اتمهای In در نمونه‌ی $InGaAsN$ که منجر به پیوندهای $In-N$ خواهند شد، سبب توزیع کتره‌ای اتمهای نیتروژن در سراسر شبکه‌ی بلوری ماده می‌گردند (شکل ۴-۱۰).



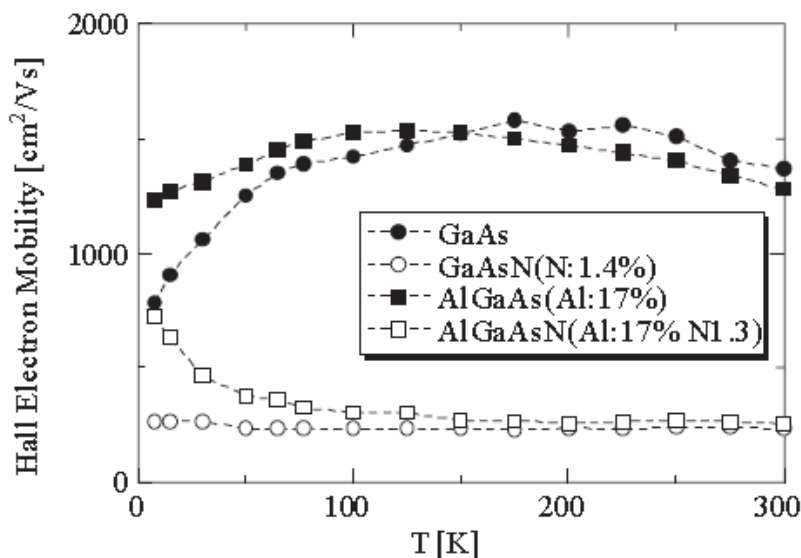
شکل (۴-۱۰): طرحی ساده از توزیع نیتروژن در (a) نمونه‌ی بدون In (b) نمونه‌ی با $[In] = 3\%$.

بدین ترتیب با توجه به محاسبات ما، از داده‌های تجربی مربوط به نمونه‌های بلوری GaN_xAs_{1-x} به ازای $x = 0.8\%$ ، دریافتیم که با افزوده شدن In با مقادیر ۳ و ۸ درصد، (حاصل شدن نمونه‌ی ترکیب چهارتایی $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ با همان درصد نیتروژن)، ملاحظه می‌شود که افزایش حضور اتمهای ایندیوم به مرور به کاهش چگالی دررفتگیهای بلوری و همچنین توزیع یکنواخت و کتره‌ای اتمهای نیتروژن در بلور منجر شود که تأثیر این دو ویژگی در افزایش تحرک الکترون‌ها در تمامی گستره‌ی دمایی ۷۰ تا ۳۰۰ کلوین بروز می‌کند.

۳-۲-۴- تأثیر حضور آلومینیوم بر تحرک الکترونی در $GaNAs$ (نمونه‌های $AlGaNaS$)

در این بخش به بررسی تأثیر حضور آلومینیوم بر تحرک الکترونی در شبکه‌ی بلوری نیمرسانای نیتروژندار رقیق $GaNAs$ پرداخته‌ایم. در اولین گام به مطالعه‌ی کیفیت بلوری این ماده از طریق بررسی رفتار سازوکارهای پراکندگی مختلف در نمونه‌ی $Al_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ ($x: 1/3\%$ و $y: 17\%$) که توسط هاشیموتو و همکاران [۴] تهیه و گزارش شده است می‌پردازیم. سپس با محاسبات نظری نشان خواهیم داد که تا چه اندازه حضور آلومینیوم در شبکه‌ی بلوری می‌تواند به توزیع کتره‌ای اتمهای نیتروژن در ماده منجر شود.

شرایط رشد این نمونه مشابه نمونه‌ی معرفی شده در بخش (۳-۲-۴) است با این تفاوت که دمای زیر لایه ۶۵۰ درجه سانتیگراد می‌باشد. شکل (۴-۱۱) داده‌های تحرک الکترونی مربوط به نمونه‌های $GaAs$ ، $AlGaAs$ ، $GaNAs$ و $AlGaNaS$ را نشان می‌دهد. چنانچه از این داده‌ها پیداست از مقایسه‌ی داده‌های مربوط به $GaAs$ و $GaNAs$ ملاحظه می‌شود که با افزایش N به بلور، تحرک حاملی تا حد زیادی کاسته شده است. علاوه بر این از مقایسه داده‌های نمونه‌های $AlGaAs$ و $AlGaNaS$ نیز تنزل تحرک کاملاً آشکار است.



شکل (۴-۱۱): داده‌های تحرک الکترونی مربوط به نمونه‌های $GaAs$ ، $GaNAs$ ، $AlGaAs$ و $AlGaNaS$

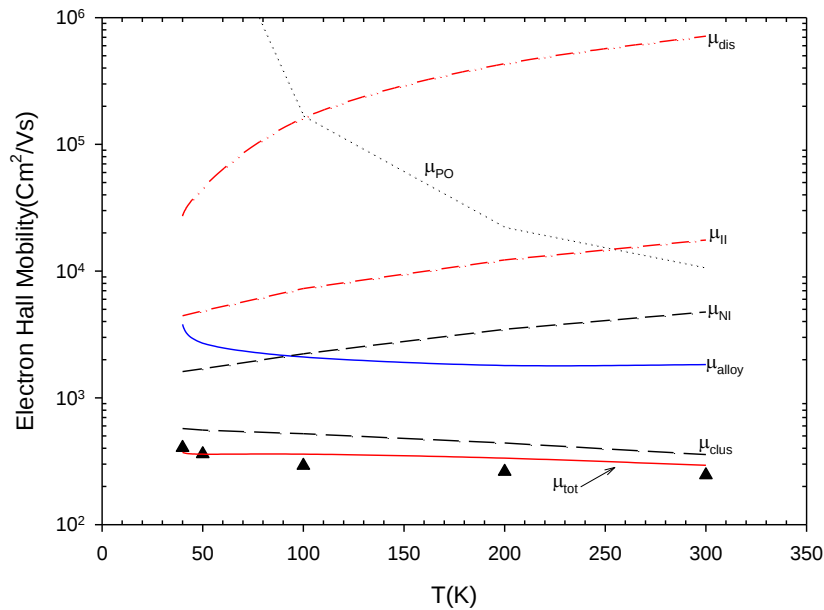
(هاشیموتو و همکاران [۴])

به منظور بررسی تأثیر حضور اتمهای Al در شبکه $GaNAs$ (که تحلیل این نمونه در بخش (۴-۲-۱) ذکر شده است)، به تحلیل داده‌های نمونه‌ی $AlGaNaS$ می‌پردازیم. نکته‌ی قابل توجه در انجام محاسبات آنکه مقدار جرم مؤثر مربوط به این نمونه، $0.08 m_0$ در نظر گرفته شده است [۱۵]. نتیجه محاسبات همراه با جزئیات رفتار سازوکارهای پراکندگی در جدول (۴-۶) و شکل (۴-۱۲) آمده است. همانگونه که در شکل می‌توان دریافت پراکندگی آلیاژی به هر دو صورت کتره‌ای و بخصوص خوشه‌ای، بیشترین سهم را در کاهش تحرک الکترونی بر عهده دارند.

جدول (۴-۶): پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه‌ی $AlGaNaS$ هاشیموتو و همکاران [۳]

$Al_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$	$N_{dis} (m^{-2})$	$N_d (cm^{-3})$	$E_d (meV)$	ϕ
$x = 1/3\%$ $y = 1\%$	3×10^{12}	1×10^{17}	۱۰	۰/۴۰

البته در دماهای کمتر از ۱۰۰ کلوین علاوه بر پراکندگی خوشه‌ای، نقش پراکندگی ناخالصیهای خنثی نیز در کاهش تحرک بسیار مهم می‌باشد. اندک عدم تطابق بین μ_{tot} و داده‌های تجربی را می‌توان ناشی از تقریبهای استفاده شده در پارامترهای مادی لایه‌ی مورد نظر دانست که ما در اینجا از پارامترهای مادی منتسب به $GaAs$ سود جست‌ه‌ایم. از مقایسه این نتایج با یافته‌های موجود در جدول (۴-۴) که مربوط به $GaN_{0.014}As$ می‌باشد، ملاحظه می‌شود که تراکم دررفتگیها در حدود یک مرتبه‌ی بزرگی کاسته شده است و این می‌تواند نشانگر تأثیر حضور اتمهای Al در بهبود کیفیت ساختار بلوری ماده باشد. از دیگر تفاوت‌های مهم در محاسبات مربوط به این دو سیستم که دارای ترکیب نیتروژن نزدیک به هم هستند، اینکه در این حالت تأثیر پراکندگی آلیاژ خوشه‌ای، برگرفته از نظریه‌ی اوریلی شکل (۳-۲)، در حدود ۱۷٪ در مقایسه با نمونه‌ی بدون آلومینیوم تضعیف پیدا کرده است. دلیل این موضوع را می‌توان ناشی از تشکیل پیوندهای کتره‌ای $Al-N$ دانست که به کاهش پیوندهای خوشه‌ای $Ga-N$ در نمونه منجر شده‌اند [۴].



شکل (۴-۱۲): نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تحرک الکترونی در

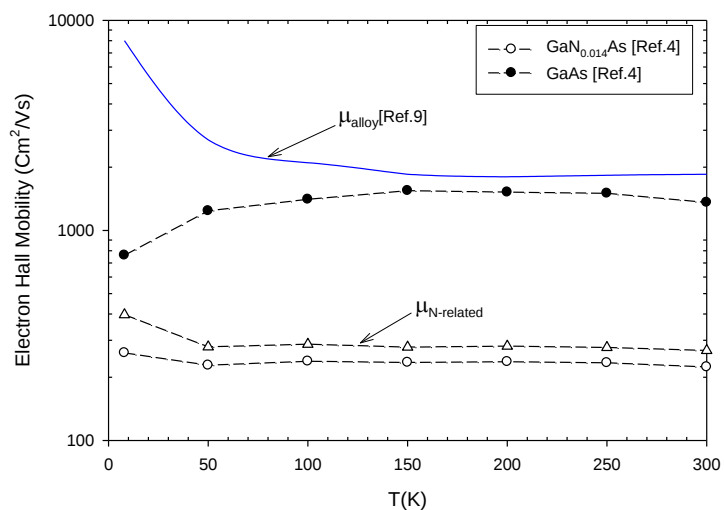
Al_{0.17}Ga_{0.83}N_{0.013}As_{0.987} (نمونه‌ی هاشیموتو [۴])

به منظور فراهم‌سازی شواهدی بیشتر در این زمینه، از منطری دیگر به بررسی داده‌های شکل (۴-۱۱) می‌پردازیم. شکل (۴-۱۳-الف و ب) داده‌های وابسته به نمونه‌های $GaN_{0.014}As$ و $GaAs$ و همچنین نمونه‌های $Al_{0.17}GaAs$ و $Al_{0.17}GaN_{0.013}As$ را به طور جداگانه نشان می‌دهد. در این دو شکل خط‌پر نشان دهنده‌ی پیش‌بینی تحرک وابسته به پراکندگی مربوط به آلیاژ کتره‌ای، برگرفته از نظریه‌های اوریلی و فاهی (شکل ۳-۱) [۹]، بوده و نمودار مثلث‌های توخالی اثر وابسته به حضور اتمهای نیتروژن در شبکه‌ی بلوری است که از رابطه‌ی ماتیسن به صورت زیر بدست آمده است:

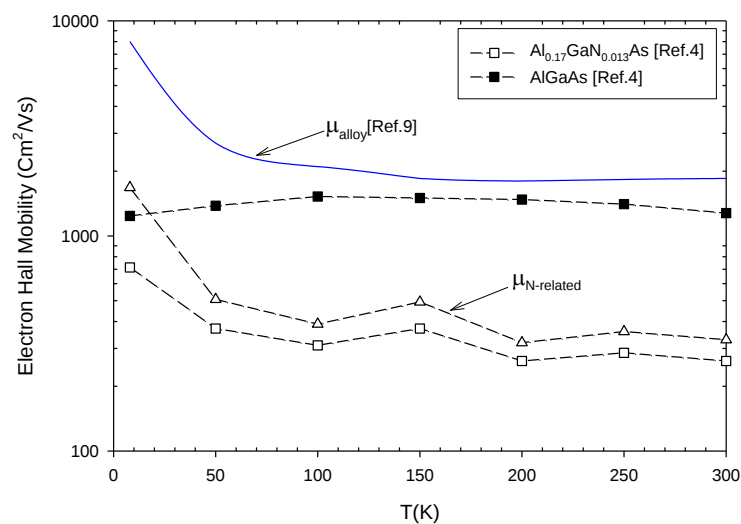
$$\frac{1}{\mu_{N-related}} = \frac{1}{\mu_{III-N}} - \frac{1}{\mu_{III-V}} \quad (۳-۴)$$

به طوری که μ_{III-N} مربوط به تحرک الکترونی در نیمرسانای نیتروژندار و μ_{III-V} تحرک الکترونی در نیمرسانای اولیه بدون نیتروژن است. انتظار می‌رود تحرک متناظر با اثر حضور اتمهای نیتروژن ($\mu_{N-related}$)، چنانچه توزیع اتمهای N به صورت کتره‌ای باشد بر منحنی نظری μ_{alloy} منطبق

باشد. بدیهی است هر چه منحنی $\mu_{N-related}$ از منحنی μ_{alloy} اختلاف بیشتری داشته باشد می توان به حضور توزیع غیر یکنواخت (خوشه‌ای) این اتمها در شبکه‌ی بلوری پی برد.



(الف)



(ب)

شکل (۴-۱۳): نمایش پراکندگی مربوط به اتم نیتروژن (نمودار مثلث توخالی) در (الف) در GaAs و GaNAs

(ب) AlGaAs و AlGaNAS

چنانچه از نتایج نظری ما در این نمونه‌ها پیداست، در نیمرسانای نیتروژندار رقیق که حاوی اتمهای Al نیز می‌باشند (شکل ۴-۱۳-ب)، به علت نزدیکی منحنی $\mu_{N-related}$ به μ_{alloy} چنین استنباط می‌شود که وجود اتمهای Al سبب شده است که توزیع اتمهای نیتروژن از حالت تجمع خوشه‌ای دور شده و به سمت یک توزیع کتره‌ای پیش رفته است. در همین ارتباط واگنر و همکاران [۱۳] توزیع غیر یکنواخت نیتروژن در $GaNAs$ و تشکیل پیوندهای $Al-N$ در $AlGaNaS$ را به روش رامان آشکارسازی کرده‌اند.

نتیجه گیری:

در سالهای اخیر مطالعه بر روی خواص نوری و الکتریکی نیمرساناهای مرکب $III-N-V$ با درصد نیتروژن پایین ($x \leq 5\%$) و ترکیب پایه‌ی $GaAs$ ، به دلیل کاربردهای فراوان آنها در قطعات گوناگون مورد توجه بسیار قرار گرفته‌اند. ویژگی منحصر به فرد این مواد نیتروژندار رقیق، خمشی بزرگ در گاف نواری آنهاست که در نیمرساناهای بدون نیتروژن مرسوم ($InGaAs$ ، $AlGaAs$ و ...) مشاهده نگردیده است. داده‌های تجربی حاکی از افت چشمگیری در تحرک الکترونی و تراکم حاملهای بار در این نیمرساناها با افزایش مقدار اندک نیتروژن است.

محاسبات نظری ما در مورد تغییرات تراکم حاملها (شکل ۴-۲) نشانگر آن است که به طور کلی تراکم تله‌های الکترونی وابسته به اتمهای نیتروژن در ترکیبات $GaNAs$ بزرگتر از مراکز تله‌ها در ترکیبات ایندیوم‌دار ($InGaNAs$) بوده و به عنوان مقایسه در محدوده‌ی $0.7\% \leq x \leq 0.8\%$ ، این نسبت به حدود ۵ تا ۶ برابر می‌رسد. همچنین بنظر می‌آید که در هر دوی این گروه نمونه‌ها با افزایش x ، تراکم این ترازها به مقدار اشباعی حدود $10^{18} cm^{-3}$ میل می‌کند.

در مورد تحلیل داده‌های وابسته به تحرک حاملی در نمونه‌های GaN_xAs_{1-x} ، به ازای $x = 0.8\%$ و $x = 1/4\%$ ، ملاحظه گردید که افزایش نیتروژن به افزایش تراکم دررفتگی‌های بلوری در ماده، جداول (۴-۳) و (۴-۴)، در حدود ۲۰ درصد می‌انجامد، همچنین به منظور دستیابی به یک برازش قابل قبول بین μ_{tot} (نظری) و μ_{exp} (تجربی)، لازم است که تأثیر پراکندگی آلیاژ خوشه‌ای حاصل از پیوندهای $Ga-N$ در نمونه‌ی با درصد کسر مولی بیشتر نیتروژن ($x = 1/4\%$)، به مقداری نزدیک به دو برابر افزایش یابد.

از تحلیل داده‌های تحرک الکترونی وابسته به نمونه‌های ترکیبات چهارتایی $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ دریافتیم: با افزایش $y = 3\%$ به $y = 8\%$ ، تراکم دررفتگیها در نمونه تقریباً به نصف کاهش یافته (جدول ۴-۵) و تحرک محدودکننده‌ی حامل مربوط به آلیاژ خوشه‌ای در این دو ترکیب به میزان ۱۰ و ۳۰ درصد نسبت به نمونه‌ی بدون ایندیوم (GaN_xAs_{1-x}) با همان درصد کسر مولی نیتروژنی ($x = 0.8\%$) کاهش یافته است.

از مقایسه‌ی نتایج مربوط به تحلیل تحرک الکترونی در نمونه‌ی آلومینیوم‌دار ($Al_{0.17}GaN_{0.013}As$) با نمونه‌ی بدون آلومینیوم با میزان نیتروژن نزدیک بهم دریافتیم که حضور اتمهای Al سبب کاهش تراکم دررفتگیها در حدود یک مرتبه‌ی بزرگی و پراکندگی آلیاژ خوشه‌ای به مقدار ۱۷٪ می‌شود.

- [1]- M. Kondow, K. Uomi, A. Niwa, T. Kitatani, Jpn. J. Appl. Phys. **35** 1273 (1996).
- [2]- K. Volz, J. Koch, " Doping behaviour of Si, Te, Zn and Mg in lattice-matched (GaIn)(NAs)/GaAs bulk films ", J. Cryst. Growth. **248** 451-456 (2003).
- [3]- T. Suzuki, T. Yamaguchi, " Electric properties of RF-MBE InGaNAAs Grown layer ", Phys. stat. sol(b), No. **7**. 2769-2772 (2003).
- [4]- A. Hashimoto, T. Yamaguchi, T. Suzuki, A. Yamamoto, J. Cryst. Growth. **278** 532-537 (2005).
- [5]- J. F. Geisz, D. J. Friedman, " Photocurrent of 1eV InGaNAAs lattice-matched to GaAs ". J. Cryst. Growth. **195**, 401-408 (1998).
- [6]- M. Adamcyk, " Epitaxial growth of Dilute Nitride-Arsenide compound semiconductors by molecular Beam Epitaxy ", PhD Thesis, University of British Columbia, Canada (2002).
- [7]- A. Fleck, B. J. Robinson, " Charactrization of defects in doped InGaNAAs grown by Molecular-beam Epitaxy ". Appl. Phys. Lett. **78**: 1694-1696 (2001).
- [8]- J. Singh, " Semiconductor Optoelectronics ", Mac Graw-Hill Inc (1995).
- [9]- S. Fahy, A. Lindsay, E. P. O'Reily, " Theory of electron mobility in dilute nitride semiconductors ", NMRC and Department of Physics, University College Cork, Irland (2004).
- [10]- R. J. Kaplar, *et al.* J. Appl. Phys. **90**; 3405 (2001).
- [11]- C. Skierbiszewski, *et al.* " Large nitrogen-induced increase of electron effective mass in InGaNAAs ", Appl. Phys. Lett. **76**; 2409-2411 (2000).
- [12]- I. Vurgaftman and J. R. Meyer. " Band parameters of N-containing Semiconductors ", J. Appl. Phys. **94**, 3675-3696 (2003).
- [13]- J. Wagner, T. Geppert, K. Kohler, Solid-state electron. **47**, 461 (2003).
- [14]- A. Hashimoto, T. Kitano, *et al.* Sol. Energy Matter. Sol. Cells. **75**, 313 (2003) .
- [15]- V. Mantovani, S. Sanguinetti, M. Guzzi. Physica E **23** 377-383 (2004).